

KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

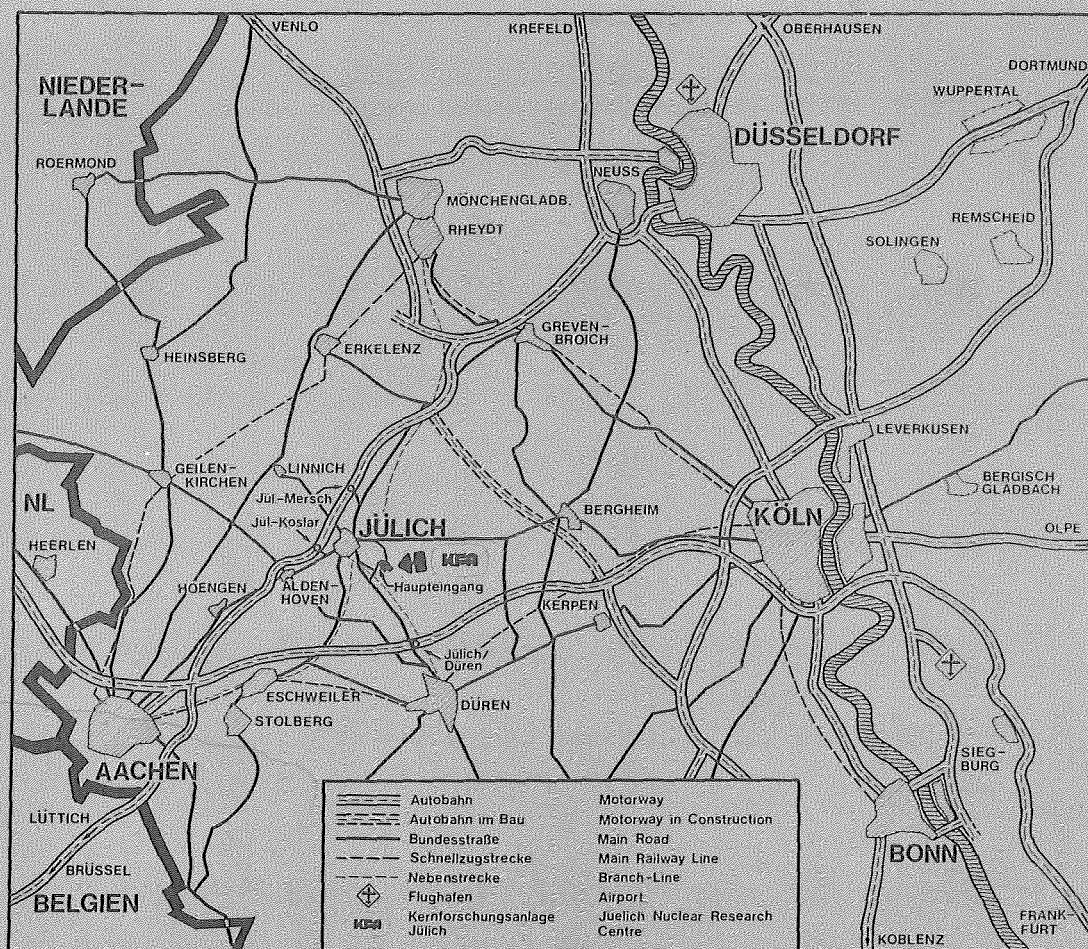
Zentralinstitut für Angewandte Mathematik

Parallelprozessoren und Algorithmenstruktur

von

F. Hoßfeld

Jül - Spez - 87
September 1980
ISSN 0343 - 7639



Als Manuskript gedruckt

Spezielle Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 87

Zentralinstitut für Angewandte Mathematik Jül - Spez - 87

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: 02461/611 · Telex: 833556 kfa d

Parallelprozessoren und Algorithmenstruktur

von

F. Hoßfeld

INHALTSVERZEICHNIS

EINLEITUNG

<u>KAPITEL 1</u>	"Transfermatrix-Methode"	6
1a)	Korrelationsfunktionen	19
<u>KAPITEL 2</u>	Grundzustände	22
<u>KAPITEL 3</u>	Resultate "Spin Gläser"	
	Einleitung	25
3a)	Ordnungsparameter	30
3b)	Korrelationsfunktionen	34
3c)	Vergleich Monte-Carlo-Methode - "exakte" numerische Resultate	38
3d)	"Asymmetrisches \pm J-Modell"	44
3e)	3-dim. Resultate	46
	Figuren	
<u>KAPITEL 4</u>	2-d Ising-Gitter mit "reihenweiser" Random- Bond-Verteilung	52
	Resultate	
	Figuren	
<u>KAPITEL 5</u>	"Random-Field"-Modelle in 2-d	92
	Resultate	
	Figuren	
<u>KAPITEL 6</u>	Zusammenfassung	107
	LITERATURVERZEICHNIS	111

Mithilfe einer neuen Transfermatrix-Methode werden numerisch exakte Resultate für kleine Gitter zweidimensionaler Random Ising-Modelle berechnet. Behandelt werden zwei Spinglas-Modelle, ein zwischen Spinglas und Ferromagnet angesiedeltes Modell sowie ein Ferromagnet mit Random-Magnetfeld. Im wesentlichen wird die Frage nach einem Gleichgewichtsphasenübergang untersucht. Das wichtigste Resultat der Arbeit ist, daß in Spingläsern ein Phasenübergang nur bei $T=0$ auftritt, und daß die experimentellen Resultate metastabile Effekte darstellen.

By a recursive transfermatrix-method numerically exact results are calculated for small random Ising lattices in two dimensions. We study two spinglas-models, a random model without frustration and an Ising ferromagnet with random magnetic field. The equilibrium properties of the above models are developed. The main result is that in spin glasses exists a phase transition only at $T=0$. The results suggest that for systems of macroscopic size the correct thermal equilibrium is probably irrelevant for experimental purposes.

Einleitung

Spingläser sind magnetische Legierungen mit einer Konzentration der magnetischen Komponente, die einerseits so groß ist, daß Erscheinungen aufgrund der Wechselwirkungen der magnetischen Momente sichtbar sind, andererseits aber so klein ist, daß keine globale periodische magnetische Ordnung vorhanden ist. Eine Übersicht über Experimente geben Mydosh /1/ und Murani /2/. Typische Spingläser sind $\text{Au}_{1-c}\text{Fe}_c$ und $\text{Cu}_{1-c}\text{Mn}_c$ im Konzentrationsbereich $0.01 \% \leq c \leq 10\%$, jedoch wurden in letzter Zeit eine Vielzahl anderer Systeme mit Spinglas-Eigenschaften entdeckt /3/. Den ersten Impuls für das große Interesse, das in den letzten Jahren den Spingläsern entgegengebracht wurde, gaben im wesentlichen die Experimente von Canella und Mydosh /4/. Danach hat die a.c. (wie auch die d.c. bei schwachem Feld /5/) Suszeptibilität $\chi(T)$ bei einer Temperatur T_f eine scharfe Spitze, die schon in einem kleinen äußeren Feld abgerundet wird. T_f hängt dabei von der Konzentration c ab, und zwar gilt für eine große Anzahl von Spingläsern /1/: $T_f \propto c$ und $T_f \approx c^m$ mit $0.55 < m < 0.75$ bei höheren Konzentrationen $0.1 \% < c < 10 \%$. Auch in anderen Experimenten wie Mößbauer-Effekt /6,7/, Myonen-Präzession /8/ und anomaler Hall-Effekt /9/ ist eine mehr oder weniger genau definierte Temperatur T_f sichtbar. In Neutronenstreuexperimenten /10/ wurde keine langreichweitige Ordnung beobachtet. Aus all diesen Experimenten folgert man, daß die Spins unterhalb T_f in statistisch verteilte Richtungen eingefroren sind. Andererseits ist dieser Ordnungsprozeß nicht in der spezifischen Wärme $C(T)$ sichtbar. $C(T)$ hat einen linearen Anstieg bei tiefen Temperaturen und ein breites Maximum oberhalb T_f /11/. Auch Widerstand /12/, Thermokraft /4/ und Ultraschall-Absorption /13/ zeigen keine wohldefinierte Temperatur T_f . Bei Kernspin-Resonanz /14/ sind die Ergebnisse noch umstritten /14/.

Andere charakteristische Eigenschaften von Spingläsern sind die Effekte, die mit der Zeitskala zusammenhängen. Mißt man z.B. die

Magnetisierung von Spingläsern über Minuten und Stunden, so kann man einen irreversiblen Anteil der Suszeptibilität und eine nur langsam verschwindende Restmagnetisierung beobachten /15,5/. Auch die spezifische Wärme zeigt solche Langzeiteffekte /16/.

Der Mechanismus für die Eigenschaften vieler Spingläser ist die Ruderman-Kittel-(RKKY)-Wechselwirkung. Sie nimmt mit $1/r^3$ mit dem Abstand r zweier Spins ab. Die RKKY-Wechselwirkung oszilliert schnell als Funktion des Abstandes. Sie wird in den theoretischen Spinglas-Modellen durch symmetrische statistische Verteilungen der Wechselwirkungen ersetzt. Man erhält somit das "Gauß-Modell", bei dem die Kopplungen einer symmetrischen Gaußverteilung gehorchen /17/. Eine weitere Abstrahierung stellt das " $\pm J$ -Modell" dar /18/, bei dem ferromagnetische (+ J) und antiferromagnetische (- J) Kopplungen statistisch verteilt sind. Die Stärke der Kopplung bleibt im Gegensatz zum "Gauß-Modell" konstant. Dieser Umstand führt zu einem unterschiedlichen Verhalten bei $T=0$, wie in dieser Arbeit gezeigt wird. Grundsätzlich ist in der bisherigen Theorie /18,19,20,21/ die Frage eines Phasenübergangs umstritten. Eine Übersicht über die bisher veröffentlichten Arbeiten enthält die Einleitung zu Kapitel 3. In der vorliegenden Arbeit wird eine neue Methode zur numerischen Behandlung der statischen Mechanik von Spingläsern vorgestellt, die "Transfermatrix-Methode" (Kapitel 1). Mithilfe dieser Methode und der in Kapitel 2 vorgestellten Methode zum Auffinden von Grundzuständen läßt sich der Ordnungsparameter ψ^2 berechnen, der eine Antwort auf die Frage nach einer Spinglas-Ordnung geben kann. Weiterhin lassen sich mit dieser Methode langreichweitige Spin-Korrelationsfunktionen bestimmen. Zusammen mit den Resultaten für ψ^2 geben sie wichtige Hinweise im Hinblick auf die Fragestellung eines Phasenübergangs. Kapitel 3 enthält die Resultate dieser Methode, die im wesentlichen darin bestehen, daß sowohl " $\pm J$ -" als auch "Gauß-Modell" für $T>0$ in zwei Dimensionen keine Spinglas-Ordnung aufweisen. Für $T=0$ zeigt das "Gauß-Modell" einen Ordnungs-

parameter =1 im Gegensatz zum "J-Modell", das aber im Grundzustand eine Spin-Korrelationsfunktion aufweist, die mit dem Abstand nicht exponentiell , sondern nach einem Potenzgesetz abfällt. In drei Dimensionen ist die neue Methode nicht ganz so erfolgreich. Jedoch scheint bei erhöhtem Rechenzeitaufwand zumindest eine Bestimmung der Spin-Korrelationsfunktionen möglich.

Kapitel 4 beschreibt die statistische Mechanik eines speziellen zweidimensionalen Random-Bond-Gitters, das allerdings zur Beschreibung der Spingläser wegen der in diesem Modell fehlenden Frustrationseffekte nur äußerst bedingt anzuwenden ist. Von theoretischem Interesse können die Resultate jedoch im Hinblick auf die Überprüfung des nach wie vor umstrittenen "Replica-Tricks"/18/ sein.

Kapitel 5 behandelt die "Random-Fields"-Modelle. Bei konstanter Kopplung sind in diesem Modell ortsabhängige Magnetfelder "random" verteilt. Mit der "Transfermatrix-Methode" werden einige analytische Resultate untermauert. Eine weitergehende Einleitung enthält wieder Kapitel 5.

Eine Zusammenfassung der in dieser Arbeit aufgeführten Resultate enthält Kapitel 6.

Referenzen zur Einleitung:

- /1/ J.A. Mydosh, AIP Conference Proceedings 24, 131 (1975)
and Amorphous Magnetism II. Plenum Press, New York
(1977).
- /2/ A.P. Murani, Jour. Mag. and Mag. Mat. 5, 95 (1977).
- /3/ J.A. Mydosh, International Conference on Magnetic
Alloys and Oxides, Haifa (1977).
- /4/ O. Canella and J.A. Mydosh, Phys. Rev. B6, 4220 (1972).
- /5/ C.W. Guy, J. Phys. F5, L242 (1975) und J. Phys. F7,
1507 (1977).
- /6/ C.E. Violet und R.J. Borg, Phys. Rev. 149, 540 (1966).
- /7/ B. Window, Phys. Rev. B6, 2013 (1972).
- /8/ D.E. Murnick, A.T. Fiony und W.J. Kossler, Phys. Rev.
Lett. 36, 100 (1976).
- /9/ S.P. McAlister und C.M. Hund, Sol. St. Comm. 19, 881
(1976).
- /10/ A. Amit, J. Appl. Phys. 36, 1093 (1965)
- /11/ L.E. Wenger und P.H. Keesom, Phys. Rev. B13, 4053 (1976).
- /12/ P.J. Ford und J.A. Mydosh, Phys. Rev. B14, 2057 (1976).
- /13/ C.F. Hawkins, AIP Conference Proceedings 29, 235 (1976).
- /14/ D.E. McLaughlin und H. Alloul, Phys. Rev. Lett. 36, 1158
(1976).
- /15/ A.P. Murani, Phys. Rev. Lett. 37, 450 (1976)

- /16/ J.L. Tholence and R. Tournier, J. Phys. 35, C4, 229 (1974).
- /17/ G. Toulouse, Comm. Phys. 2, 115 (1977).
- /18/ P.W. Anderson, Amorphous Magnetism II, Plenum Press, New York (1977).
- /19/ K. Binder, Festkörperprobleme XVII, S. 55, J. Treusch (ed.), Vieweg, Braunschweig (1977).
- /20/ K.H. Fischer, physica 86-88 B+C, 813 (1977).
- /21/ D. Sherrington, AIP Conference Proceedings 29, (1976).

KAPITEL 1

"Transfermatrix"-Methode

Im folgenden Kapitel wird eine neue Methode vorgestellt, die dazu dient, numerisch exakte Resultate der freien Energie kleiner zweidimensionaler Ising-Gitter zu berechnen.

Grundsätzlich ist es möglich, die freie Energie des folgenden Hamiltonian für beliebige Verteilungen $P\{J_{ij}\}$ und $P\{h_i\}$ zu erhalten

$$-\beta \mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j + \sum_i h_i s_i \quad (1.1)$$

$\langle \dots \rangle$ bedeutet nächste Nachbarwechselwirkung

J_{ij} ist die Kopplungskonstante zwischen nächsten Nachbarn

h_i ein am Ort i wirkendes Magnetfeld

$s_i = \pm 1$ d.h. Ising-Spins.

In der vorliegenden Arbeit wurden drei spezielle Probleme behandelt.

1.) Random-Bond-Modell für Spingläser

mit der Verteilung für die Kopplungskonstante

$$P(J_{ij}) = x \cdot \delta(J_{ij} - J) + (1-x) \delta(J_{ij} + J)$$

für $x = \frac{1}{2}$ erhält man das $\pm J$ -Modell, es wurden auch Untersuchungen für $x < \frac{1}{2}$ vorgenommen.

2.) Gauß-Modell für Spingläser

Die Kopplungskonstanten gehorchen einer Gaußverteilung

mit $\bar{J}=0$

in den Fällen 1.) und 2.) ist das Magnetfeld an allen Orten i ,
 $h_i=0$

3.) "Random-Field"-Modell

Hier ist die Kopplungskonstante $J_{ij}=J$ konstant für alle Bindungen.

Das Random-Field $h_i=\epsilon_i h$ variiert von Ort zu Ort, wobei ϵ_i der Verteilung gehorcht

$$P(\epsilon_i) = \frac{1}{2} \delta(\epsilon_i - 1) + \frac{1}{2} \delta(\epsilon_i + 1)$$

Die freie Energie wird mit der neuen Methode exakt für eine bestimmte Konfiguration der J_{ij} bzw. h_i berechnet.

Für den hier interessierenden "quenched case" muß die freie Energie noch über alle dieser möglichen Konfigurationen gemittelt werden. In der vorliegenden Methode kann dies nur approximativ geschehen, indem man über eine gewisse Anzahl statistisch voneinander unabhängigen Random-Konfigurationen arithmetisch mittelt. Eine Anzahl von 20-30 Konfigurationen zeigte bei den behandelten Problemen (1.)-3.)) schon eine genügende Genauigkeit, wobei schon hier erwähnt sei, daß bestimmte Größen (wie etwa der Ordnungsparameter ψ^2) weitaus mehr als andere (etwa die spezifische Wärme) von der Random-Konfiguration abhängen.

Die Bezeichnung "Transfermatrix-Methode" ist auf den ersten Blick etwas irreführend. Die neue Methode hat mit der bisher bekannten "Transfermatrix-Methode" von Onsager das Prinzip gemeinsam, von Reihe zu Reihe vorzugehen und quasi "zeilenweise die Spur zu ziehen". Sie hat jedoch, was ihre numerische Realisierung betrifft, den bedeutenden Vorteil statt $2^{2 \cdot L}$ Speicherplätzen im Computer nur 2^L zu besetzen (L - Linear-dimension). Außerdem wird die "Transfermatrix" nicht diagonalisiert, um aus den Eigenwerten die interessierenden thermodynamischen Größen zu berechnen, sondern schrittweise von Spin

zu Spin vorgegangen, so daß Realisierungen beliebiger Random-Konfigurationen und -Magnetfelder exakt mitgenommen werden können. Der Unterschied im Speicherplatzbedarf 2^L zu 2^{2L} macht es darüberhinaus erst möglich, genügend große Gitter mit einem vertretbaren Aufwand zu berechnen. Wegen des dennoch großen Speicherplatzbedarfs konnten nur Gitter bis zu einer Größe von $L=18$ berechnet werden. Monte Carlo-Rechnungen für vergleichbar große Systeme /11,5/ haben jedoch alle charakteristischen Eigenschaften von Spingläsern gezeigt. Künftige Generationen von Computern werden es sicher ermöglichen, auch größere Gitter mit dieser "Transfermatrix-Methode" zu berechnen.

Nun aber zur Beschreibung der Methode: Berechnet wird die freie Energie

$$F = - k_B T \cdot \frac{1}{N} \ln Z (J_{ij}, h_i) \quad (1.2)$$

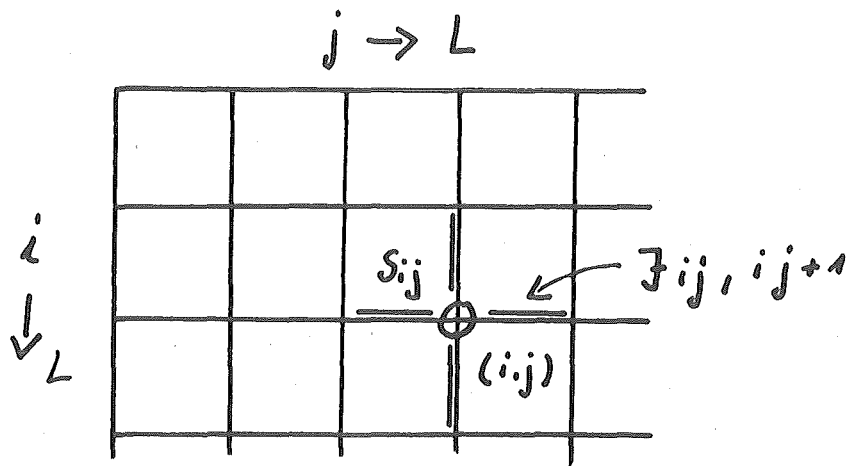
k_B = Boltzmannkonstante

T = Temperatur

N = Anzahl der Spins d.h. L^2

$Z(J_{ij}, h_i)$ = Zustandssumme, abhängig von der gegebenen Bond-Konfiguration und dem Magnetfeld am Ort i .

Wir betrachten auf einem 2-dimensionalen Gitter den Spin am Ort ij .



Im folgenden seien alle Punkte auf dem Gitter gemäß Fig. 1 mit Koordinaten (i,j) bezeichnet. Am Ort (ij) befindet sich der Spin S_{ij} . Dieser Spin ist mit seinem Nachbarn zur Rechten durch die Konstante $J_{ij,ij+1}$ gekoppelt. Wie wir später sehen werden, sind periodische Randbedingungen nur in horizontaler Richtung möglich. In vertikaler Richtung befinden sich also zwei freie Ränder. Für den Hamiltonian (1.1) ergibt sich daraus folgende ausführliche Schreibweise:

$$\begin{aligned}
 -\beta \mathcal{H} = & \sum_{ij} J_{ij,ij+1} \cdot S_{ij} \cdot S_{ij+1} + \sum_{ij} h_{ij} \cdot S_{ij} + \\
 & \text{horizontaler Anteil} \\
 & + \sum_{ij} J_{ij,i+1,j} \cdot S_{ij} \cdot S_{i+1,j} \\
 & \text{vertikaler Anteil}
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

wie gezeigt, läßt er sich in einen horizontalen und einen vertikalen Anteil aufspalten. Die Zustandssumme ergibt sich nun aus der Summe über alle möglichen Spin-Konfigurationen $\{S_{ij}\}$

$$Z = \sum_{\{S_{ij}\}} \exp \{ -\beta \mathcal{H} \} \tag{1.4}$$

Diese Summation über alle Konfigurationen läßt sich nun reihenweise aufteilen. Mit eingesetztem Hamiltonian ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 Z = & \sum_{\{S_{Lj}\}} \sum_{\{S_{L-1,j}\}} \dots \sum_{\{S_{1j}\}} \\
 & \exp \left\{ \sum_{ij} J_{ij,ij+1} \cdot S_{ij} \cdot S_{ij+1} + \dots \right.
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

wobei etwa S_{nj} die Summation über alle möglichen Konfigurationen der n-ten Reihe bedeutet.

Aufgeteilt in horizontalen und vertikalen Anteil ergibt sich für Z:

(1.6)

$$Z = \sum_{\{s_{1j}\}} \dots \sum_{\{s_{2j}\}} \sum_{\{s_{nj}\}} .$$

$$\prod_{(i=1)j}^n \exp \{ F_{1j, 1j+1} \cdot s_{1j} \cdot s_{1j+1} + k_{1j} \cdot s_{1j} \}$$

$$\prod_{(i=1)j}^n \exp \{ F_{ij, 2j+1} \cdot s_{1j} \cdot s_{2j} \}$$

⋮

$$\prod_{(i=n)j}^n \exp \{ F_{nj, nj+1} \cdot s_{nj} \dots \}$$

⋮

Diese Zustandssumme läßt sich nun rekursiv berechnen. (Bem.: aus programmtechnischen Gründen wird die freie Energie, also $\ln Z$ berechnet. Dieser Umstand wird in der nachfolgenden Programmbeschreibung noch untersucht). Die Berechnung von Z erfolgt im wesentlichen in drei Schritten.

1. Schritt

Man startet mit der ersten Reihe, d.h. $i=1$: alle möglichen Zustände $\{S_{1j}\}$ der L Spins dieser ersten Reihe werden generiert. Dann wird eine Konfiguration der zweiten Reihe festgehalten und mit allen möglichen Zuständen der 1. Reihe kombiniert. Die statistischen Gewichte unter Mitnahme des vertikalen Faktors werden aufmultipliziert gemäß Formel (1.6). Anschließend wird über alle Zustände $\{S_{1j}\}$ summiert, also die Spur über die erste Reihe gezogen.

2. Schritt

Eine weitere Konfiguration der 2. Reihe $\{S_{2j}\}$ wird generiert. Sie wird wieder mit allen Konfigurationen der ersten Reihe kombiniert und nach Berücksichtigung der vertikalen Bindungen die Spur gezogen. Das Resultat wird getrennt abgespeichert. Im weiteren werden alle 2^L Zustände der zweiten Reihe jeweils einzeln mit allen Konfigurationen der ersten Reihe kombiniert. Die statistischen Gewichte werden getrennt abgespeichert. Somit ergibt sich ein Speicherplatzbedarf von 2^L Plätzen, d.h. für die hier beschriebenen Rechnungen eine Einschränkung $L \leq 18$. Die Zustände der ersten Reihe sind somit verarbeitet und werden vom Programm quasi "vergessen", da jetzt nur 2^L Summen über die erste Reihe abgespeichert werden. Aus diesem Grunde ist eine spätere Kombination mit den Spins der L -ten Reihe nicht möglich. Eine Mitnahme der ersten Reihe würde den Speicherplatzbedarf wieder auf 2^{2L} erhöhen, also die Methode sehr stark einschränken. Wie wir später allerdings sehen werden, spielen die beiden freien Ränder bei den erwähnten Resultaten keine bedeutende Rolle.

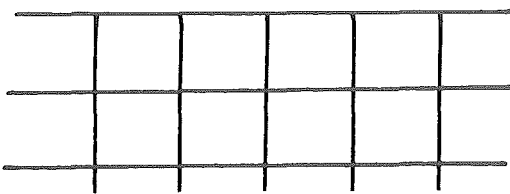
3. Schritt

Man geht nun von Reihe zu Reihe weiter. Eine Konfiguration der dritten Reihe wird festgehalten und mit den abgespeicherten Konfigurationen der zweiten Reihe kombiniert. Anschließend wird wieder die Spur über alle Zustände $\{S_{2j}\}$ gezogen und die Resultate einzeln abgespeichert.

Nach der letzten Reihe wird die Quersumme über alle Speicherplätze gezogen und der Logarithmus gebildet, um die freie Energie zu erhalten.

Hier vielleicht noch eine anschauliche Erklärung:

freier Rand



1

2

3

Die Spins der ersten und dritten Reihe haben keine Wechselwirkung, wie überhaupt wegen der nur horizontalen periodischen Rand-

bedingungen die Spins der ersten Reihe nur mit denen der zweiten Reihe wechselwirken. Aus diesem Grunde ist es möglich, nach Behandlung der Kopplung mit der zweiten Reihe schon die Spur über die erste Reihe zu ziehen. Nach Behandlung der Kopplung der zweiten mit der dritten Reihe kann analog die Spur über die zweite Reihe gezogen werden, usw.

Bei der Realisierung der oben aufgezeigten Vorgehensweise ergibt sich noch eine wesentliche programmtechnische Schwierigkeit: der "Overflow" d.h. die in der Maschine auftretenden Zahlen werden zu groß. Diese Schwierigkeit kann man aber umgehen, indem man statt der Zustandssumme die freie Energie berechnet, also

$$F = -k_B T \cdot \frac{1}{N} \ln Z$$

N - Zahl der Spins

Man schreibt die Zustandssumme

$$Z = C'_1 \cdot C'_2 \cdot \dots \cdot C'_L \cdot Z_R$$

d.h. man zieht reihenweise Konstanten aus den Speicherplätzen

heraus, und zwar so, daß die übrigbleibenden Zahlen klein bleiben. Nun bildet man für jede solche Konstante C_i den Ausdruck $\frac{1}{N} \ln C_i$, der ebenfalls klein bleibt. Für die freie Energie gilt nun:

$$F = -k_B T \cdot \left\{ \frac{1}{N} \left\{ \ln C_1 + \ln C_2 + \dots \right\} + \frac{1}{N} \ln Z_R \right\} \quad (1.7)$$

d.h. die $\frac{1}{N} \ln C_i$ werden reihenweise aufsummiert. Z_R erhält man wieder als Quersumme der in den Speicherplätzen verbleibenden Zahlen. Durch geschickte Wahl der Konstanten C_i läßt sich nun der gefürchtete "Overflow" vermeiden. Darüber wird in der folgenden Programmbeschreibung noch näher eingegangen.

Programmbeschreibung

In einer etwas vereinfachten Programmiersprache wird auf die wesentlichen Punkte des Programms eingegangen.

Vereinfachte Schreibweise des Programms

```

Do 1 u = 1,L
Do 2 k = 2,L
E = Ju,k;u,k+1           horizontale Bindung
H = hu,k                 Magnetfeld am Ort u,k
C = 0
Do 3 J = 1.2K-1
Do 4 I = 1.2(L-K)
I1 = I+2*(J-1)*2(L-K)
IE = I1+2(L-K)
A(I1) = A(I1)·exp{E+H- $\ln C_1$ }
A(IE) = A(IE)·exp{-E-H- $\ln C_1$ }
C = C + {A(I1)+A(IE)}/2L
4 Continue
E = -E

```

3 Continue

$$F = F - (\ln C) / N$$

$$C1 = C$$

2 Continue

Im ersten Teilabschnitt wird der horizontale Anteil der freien Energie berechnet.

Die Schleife 1 u=1,L gibt den Reihenindex an zur Vereinfachung betrachten wir die erste Reihe.

Die Schleifen 2-4 dienen dazu, sukzessiv alle möglichen Konfigurationen dieser ersten Reihe zu generieren. Gleichzeitig erhalten diese Konfigurationen ihr statistisches Gewicht, das im Feld A, das 2^L Speicherplätze (= Konfigurationen) aufweist, abgespeichert wird.

Die Schleifen 2-4 besetzen dabei schrittweise das Feld A mit Blöcken mit Spins \uparrow bzw. Spins \downarrow und multiplizieren die statistischen Gewichte der entstehenden Bindungen sowie des Magnetfeldes auf. Dadurch entstehen nacheinander alle möglichen Konfigurationen der Kette in der ersten Reihe.

Der Speicherplatz A(1) enthält das statistische Gewicht der Kette mit allen Spins \uparrow . Bei A(2) ist der letzte Spin umgedreht. Durch weiteres Umdrehen der Spins sind alle Konfigurationen im Feld A enthalten.

Bisher sind noch keine periodischen Randbedingungen (d.h. Bindung des letzten zum ersten Spin) enthalten. Außerdem fehlt die Kopplung des ersten Spins an das Magnetfeld. Dazu dient der nächste Teilabschnitt.

$$C3 = 0$$

$$E = J_{u,N,u,1} \quad \text{horizontale Bindung 1. - letzter Spin}$$

$$H = h_{u,1} \quad \text{Magnetfeld 1. Spin}$$

$$\text{Do } 11 \text{ } K = 1, 2$$

$$\text{Do } 12 \text{ } I1 = 1, 2^{L-1}$$

$$I = I1 + (K-1) \cdot 2^{L-1}$$

$$A(I) = A(I) \cdot \exp\{E + H - \ln C1\}$$

$$C3 = C3 + A(I)$$

12 E = -E

H = -H

11 E = -E

Die Konstanten C bzw. C1 dienen dazu, numerische Schwierigkeiten zu vermeiden. Nach jeder Belegung des Feldes A mit neuen statistischen Gewichten wird die Quersumme C gebildet und durch die Zahl der Speicherplätze (2^L) dividiert, also ein "Mittelwert des Feldes A" gebildet. Alle Zahlen des Feldes A werden beim nächsten Schritt durch diese Konstante (jetzt C1 aus programm-technischen Gründen) dividiert, um die im Feld A auftretenden Zahlen größenmäßig klein zu halten und einen "Overflow" damit zu verhindern. Der Logarithmus dieser Konstanten wird gemäß Gleichung (7) aufsummiert. Die Konstante C3 dient dazu, die nach dem letzten Schritt notwendige Quersumme und damit $\ln Z_R$ aus Gleichung (7) zu ermitteln. Die Schleifen 11 und 12 sind der letzte Rechenschritt des Programms, da die letzte Reihe nur horizontale Bindungen aufweist und keine vertikalen Randbedingungen mitgenommen werden.

Der dritte Teilabschnitt wird deshalb für $M=L$ übersprungen. Er dient dazu, die vertikalen Bindungen zu generieren und bereits die Spur über "nicht mehr benötigte" Spins zu ziehen (Spur = Summation über alle möglichen Zustände).

if (M.EQ.L) goto 20

C2 = 1

C = 0

Do 14 K=1,N

E = $J_{u,k;M+1,K}$ vertikale Bindung

Do 15 J=1, 2^{K-1}

Do 16 I=1, 2^{L-K}

I1 = $I + 2 \cdot (J-1) \cdot 2^{L-K}$

IE = $I1 + 2^{L-K}$

X = $A(I1)/C2$

Y = $A(IE)/C2$

$A(I1) = X \cdot \exp E + Y \cdot \exp(-E)$

$A(IE) = X \cdot \exp(-E) + Y \cdot \exp(E)$

$C = C + (A(I1) + A(IE)) / 2^L$

```

16 Continue
15 Continue
  C2=C
  F=F-(ln C)/N
14 Continue
  1 Continue
20 Continue
F=F-(ln C3)/N

```

Beispiel:

Die erste Reihe der Spins sei generiert.

Das Feld A(1) enthält alle Spins nach oben $\uparrow \dots \uparrow$.

Das Feld A($2^{L-1}+1$) enthält alle Spins nach oben außer dem ersten $\downarrow \uparrow \dots \uparrow$.

Die Schleifen 15-16 setzen nun zuerst den ersten Spin der 2.

Reihe an diese beiden Ketten. Zuerst nach oben:

$\uparrow \dots \uparrow$	bzw.	$\downarrow \uparrow \dots \uparrow$
\vdots		\vdots
\uparrow Gewicht e^E		\uparrow e^{-E}

dann nach unten

$\uparrow \dots \uparrow$	bzw.	$\downarrow \uparrow \dots \uparrow$
\vdots		\vdots
\downarrow e^{-E}		\downarrow e^E

Das Programm zieht nun die Spur über den ersten Spin. D.h. es summiert die beiden Zustände $\uparrow \dots \uparrow$ $\downarrow \uparrow \dots \uparrow$

\uparrow \uparrow

auf und speichert diese Summe im Feld A(1) ab. Analog wird die Summe mit dem ersten Spin der 2. Reihe nach unten in A($2^{L-1}+1$) abgespeichert.

Der gleiche Vorgang wiederholt sich durch "Ansetzen" des 1. Spin der 2. Reihe an alle weiteren Konfigurationen. Die "komplementären" Konfigurationen, die sich nur im 1. Spin 1. Reihe (auf oder ab) unterscheiden, werden aufsummiert und so abgespeichert, daß sie den Platz einnehmen, den vorher die analoge Konfigura-

tion der 1. Reihe besetzt hatte.

D.h. $\uparrow \dots \uparrow$ alle Spins nach oben wird ersetzt durch

$$\begin{array}{ccccccc} \uparrow & \dots & \uparrow & & \downarrow & \uparrow & \dots & \uparrow \\ & & & & + & & & \\ \uparrow & & & & & & & \uparrow \end{array}$$

also 1. Spin - 2. Reihe nach oben, alle anderen nach oben, außer 1. Spin - 1. Reihe, über den bereits summiert ist.

Dieses Vorgehen wiederholt sich analog für alle weiteren Spins der 2. Reihe. Dabei werden die Spins der 2. Reihe im Feld A genauso aufgelistet wie vorher die Spins der ersten Reihe.

Nach Herausziehen und Aufsummieren der Konstanten C bzw. C2 kann das Programm nach dem letzten Spin der zweiten Reihe wieder zum Teilabschnitt 1 zurückkehren und die Gewichte der horizontalen Bindungen sowie des Magnetfelds berechnen. Die Spin-Konfigurationen der 2. Reihe sind nach dem gleichen Schema abgespeichert wie vorher die der ersten Reihe und somit kann sich der ganze Vorgang von vorne wiederholen, bis L Reihen abgearbeitet sind. Der dritte Teilabschnitt wird wegen der fehlenden Randbedingungen in vertikaler Richtung wie oben erwähnt übersprungen. Die endgültige freie Energie ergibt sich aus (1.7)

$$F = -k_B T \left\{ \frac{1}{N} \left\{ \ln C' (1. \text{Reihe}) + \ln C' (2. \text{Reihe}) \right. \right. \\ \left. \left. + \dots \right\} + \frac{1}{N} \ln Z_R \right\}$$

1. Klammer {...} wird in den Schleifen durch $F = F - (\ln C)/N$ berechnet.

Im Prinzip ist es möglich, die Konstanten C auf andere Art und Weise zu berechnen. Bei tiefen Temperaturen treten bei der oben beschriebenen Methode wieder numerische Schwierigkeiten ("Overflow") auf. Durch eine geschickte Steuerung der Konstanten C läßt sich diese Schwierigkeit aber umgehen. Die neue Methode ist etwas zeitaufwendiger und wurde deshalb nur bei tiefen Temperaturen angewendet. Sie benutzt statt des Mittelwertes des Feldes A für die Konstante C den Maximalwert der im Feld A auf-

tretenden Zahlen. Die neue Konstante C wird nun so gesteuert, daß der Maximalwert im Feld A nach Division bis nahe an die größte im Computer zur Verfügung stehende Zahl heranrückt. Diese Zahl muß entsprechend kleiner gewählt werden, um zu verhindern, daß bei erneutem Aufmultiplizieren eines statistischen Gewichts, diese größtmögliche Zahl des Computers überschritten wird. Mit dieser Methode wird die numerische Kapazität bzw. Genauigkeit der Maschine besser ausgenutzt und gleichzeitig numerische Schwierigkeiten eingedämmt.

Die gewünschten thermodynamischen Größen lassen sich nun durch numerisches Ableiten der freien Energie berechnen.

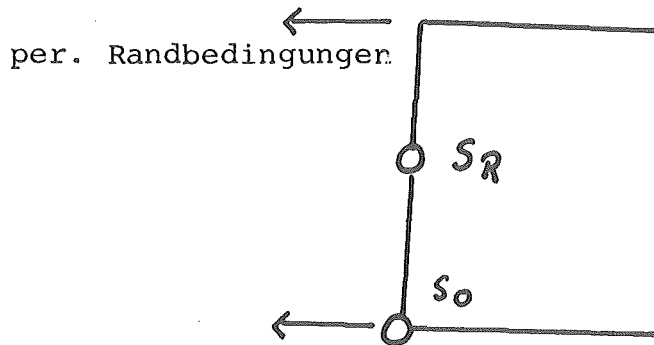
"Dreidimensionale Transfermatrixmethode"

Die bisher beschriebene Methode für zweidimensionale Ising-Gitter läßt sich auch auf drei Dimensionen verallgemeinern. Der Speicherplatz für einen L^3 -Würfel steigt aber, wie wir noch sehen werden, auf 2^{L^2} . Das schränkt die maximale Systemgröße auf 4^3 ein. Das Vorgehen in 3-d ist im allgemeinen analog zu zwei Dimensionen. Statt reihenweise wird jetzt die Spur flächenweise gezogen. Das Programm generiert alle 2^{L^2} Zustände der $L \times L$ -Grundfläche. Hier sind periodische Randbedingungen in beiden Richtungen in der Fläche möglich. Senkrechte periodische Randbedingungen müssen analog zu 2-d wieder entfallen. Alle entstandenen Konfigurationen der Grundfläche werden nun einzeln mit denen der darüberliegenden Fläche kombiniert und die Gewichte wieder getrennt abgespeichert. Man geht nun von Fläche zu Fläche vor wie im zweidimensionalen von Reihe zu Reihe. In der dritten Dimension läßt sich das System beliebig verlängern. Die vorliegende Methode ist für die in 2-d durchgeführten Rechnung in drei Dimensionen allerdings ungeeignet, wegen der Kleinheit des Systems. Allerdings läßt sich die Methode wegen der Vergrößerungsmöglichkeit in einer Lineardimension wohl für Korrelationsfunktionsberechnungen sowie für Ortsraumrenormierungsrechnungen anwenden.

KAPITEL 1a)

Berechnung der Korrelationsfunktionen $\langle S_O S_R \rangle^2$ (2-dimensional)

Der Spin S_O befindet sich in der unteren linken Ecke auf dem freien Rand, der Spin S_R im Abstand R senkrecht darüber



Die Korrelation dieser Spins als Funktion des Abstands R stellt eine wesentliche Information über die Phase des Systems dar. Eine Modifikation der "Transfermatrix-Methode" erlaubt es nun, diese Größe zu berechnen.

Dazu betrachten wir noch einmal die Programmbeschreibung der "Transfermatrix-Methode".

Nachdem die Schleife $1 \leq u \leq L$ abgelaufen ist, d.h. das Gitter vollständig berechnet ist, sind im Feld A die Konfigurationen nach folgender Struktur abgespeichert:

In der ersten Hälfte, also Platz $A(1)$ bis Platz $A(2^{L-1})$ befinden sich alle Konfigurationen (größtenteils schon aufsummiert) mit der Eigenschaft, daß der 1. Spin der L -ten Reihe (S_O) nach oben steht. Dies geht aus dem Verfahren hervor, nach dem die Konfigurationen grundsätzlich abgespeichert werden. Analog befinden sich in der zweiten Hälfte ($A(2^{L-1}+1)$ bis $A(2^L)$) alle Konfigurationen mit dem Spin S_O nach unten.

An den Spin S_R wird nun ein Feld h_R angelegt. In der Zustandssumme ergibt dies ein Gewicht $\exp\{S_R \cdot h_R\}$. Betrachtet man nur die erste Hälfte des Feldes A , d.h. $S_O=1$, gilt

$$\exp\{S_R \cdot h_R\} = \exp\{S_O \cdot S_R \cdot h_R\}$$

Ohne symmetriebrechende Magnetfelder haben im "+ J- und Gaußmodell" spiegelbildliche Konfigurationen einfach wegen der

Transformation $\sigma_i = -S_i$ gleiche Energien und damit gleiche statistische Gewichte. Das heißt: alle Konfigurationen in der ersten Hälfte haben ein Spiegelbild mit gleicher Energie in der zweiten Hälfte des Feldes A. Da für die Korrelation $S_0 S_R$ gleiche Werte für die Spiegelbilder gelten, genügt es im folgenden, nur die erste Hälfte des Feldes A zu betrachten, d.h. diese Quersumme bei der Bildung der freien Energie doppelt zu nehmen. D.h.

$$F(h_R) = -k_B T \cdot \frac{1}{N} \ln \left\{ 2 \cdot \sum_{i=1}^{2^{L-1}} A(i) \right\} \quad (1.8)$$

wobei die aus A herausgezogenen Konstanten hier außer acht gelassen wurden.

Für die zweite Hälfte, d.h. $S_0 = -1$ gilt analog

$$\exp \{ s_R \cdot h_R \} = \exp \{ s_0 s_R (-h_R) \}$$

man erhält also die freie Energie bei negativem Feld am Spin S_R .

$$F(-h_R) = -k_B T \frac{1}{N} \ln \left\{ \sum_{i=2^{L-1}+1}^{2^L} A(i) \right\} \quad (1.9)$$

ebenfalls ohne Berücksichtigung der Konstanten, die allerdings wegen des Programmaufbaus die gleichen Werte haben. Somit läßt sich die freie Energie bei positivem bzw. negativem Feld am Spin S_R in einem Rechengang bewältigen. Dies ist nützlich bei der numerischen Berechnung der zweiten Ableitung nach dem Feld h_R . Für die 2. Abl. gilt:

$$F(h_R) = -k_B T \frac{1}{N} \ln \sum_{\{S_i\}} \exp \{ J_{ij} S_i S_j + s_0 s_R h_R \}$$

$$\frac{\partial^2 F(h_R)}{\partial h_R^2} \bigg|_{h_R=0} \propto \langle s_0 s_R s_0 s_R \rangle - \langle s_0 s_R \rangle^2 \quad (1.10)$$

d.h. mithilfe dieser 2. Ableitung läßt sich die Korrelation $\langle S_O S_R \rangle^2$ direkt berechnen. Die quadratische Form muß benutzt werden, um Schwierigkeiten beim Mitteln über verschiedene Random-Konfigurationen zu vermeiden.

In drei Dimensionen ist eine solche Separierung der Konfiguration grundsätzlich ebenfalls möglich. Als Spin S_O muß ein Spin der Grundfläche herausgenommen werden.

KAPITEL 2

Grundzustände

Für eine sinnvolle Behandlung des Spinglas-Problems ist, wie wir später sehen werden, die Kenntnis der Grundzustände des Systems unerlässlich. Zur Generierung der Grundzustände wurden in der vorliegenden Arbeit im wesentlichen zwei Methoden benutzt: eine neue "Kombinationsmethode" und die Monte-Carlo-Methode. Sie beruhen beide auf der Kenntnis der Grundzustandsenergie, die man durch numerisches Ableiten bei möglichst tiefen Temperaturen, der mithilfe der "Transfermatrixmethode" gefundenen freien Energie, erhält. Ein Vergleich mit der inneren Energie der durch die nachfolgend beschriebene "Kombinationsmethode" bzw. durch die Monte-Carlo-Rechnungen gefundenen "Tieftemperatur"-Zustände ermöglicht eine Antwort auf die Frage, ob es sich bei dem vorliegenden Zustand wirklich um einen Grundzustand handelt oder nicht.

a) "Kombinationsmethode"

Diese Methode arbeitet analog der "Transfermatrix-Methode" rekursiv und geht ebenfalls reihenweise vor.

In der ersten Reihe werden alle 2^L Zustände generiert und die innere Energie dieser Konfigurationen berechnet. Das Programm sucht sich nun die k-tiefsten dieser Konfigurationen.

Im nächsten Schritt werden die k-tiefsten Konfigurationen mit allen möglichen Zuständen der 2. Reihe kombiniert. Die ℓ -tiefsten Zustände dieser neu entstandenen Konfigurationen aus zwei Reihen werden nun ebenfalls vom Programm notiert. Auf diese Art und Weise geht man nun von Reihe zu Reihe weiter, bis das Gitter vollständig aufgebaut ist. Ein Vergleich des tiefsten Zustandes mit der Grundzustandsenergie stellt fest, ob es sich bei diesem nun um einen Grundzustand handelt. k, ℓ, \dots ,

d.h. die Zahl der Zustände, die von Reihe zu Reihe mitgenommen werden, läßt sich beliebig steuern. Im Falle einer negativen Entscheidung kann also die Prozedur wiederholt werden, wobei die $k, l \dots$ erhöht werden. Diese Methode zeigte bei kleinen Systemen sehr gute Ergebnisse ist aber bei größeren zu zeitaufwändig. Für diese größeren Systeme wurde deshalb auf die bekannte "Monte-Carlo-Methode" zurückgegriffen. Eine Random-Konfiguration wurde vorsichtig über einen größeren Temperaturbereich abgekühlt ($k_B T/J = 2 \rightarrow 0.2$). Durch Erhöhen der Abkühlzeit sowie erneutes Aufheizen auf $k_B T/J=2$ und folgendes Abkühlen konnten im wesentlichen alle gewünschten Grundzustände gefunden werden. Außerdem erhielten wir wichtige Informationen über die notwendige Abkühlzeit, die ein Maß dafür ist, wie lange das System braucht, um ins thermodynamische Gleichgewicht zu gelangen.

Schwierigkeiten, die Grundzustände in vertretbaren Rechenzeiten zu erreichen, tauchten nur bei den 16×16 -Gittern des "Gaußmodells" auf. Eine Änderung des Monte-Carlo-Programms brachte allerdings nur geringe Verbesserungen. Statt bisher nur einen Spin zu flippen, war es dem Programm nun möglich, einen Bereich aus fünf Spins



umzudrehen. Dies sollte es ermöglichen, die doch sehr hohen Energiebarrieren im Gaußmodell mit höherer Wahrscheinlichkeit zu überspringen. Diese Änderung erbrachte schon eine höhere Ausbeute an Grundzuständen, jedoch spielte das Glück weiterhin eine ziemlich große Rolle.

Die gefundenen Grundzustände dienten nun im wesentlichen dazu, die Richtung des parallel zu den Grundzustandsspins liegenden "staggered Field" anzugeben, das nun an die Systeme angelegt wurde. Durch zweimaliges Ableiten der freien Energie nach diesem "staggered Field" erhält man den Ordnungsparameter ψ^2 ,

$$\psi^2 = k_B T \chi_4 / N = \sum_{i,j} \langle s_i s_j \rangle_0 \langle s_i s_j \rangle_T / N^2$$

wobei allerdings über alle Grundzustände gemittelt werden müßte. Genaue Betrachtungen der Resultate zeigten jedoch, daß es genügt, nur einen Grundzustand anzulegen, um eine gewünschte Genauigkeit zu erzielen.

In drei Dimensionen wurde aus Gründen der Einfachheit nur die Monte-Carlo-Methode angewendet.

KAPITEL 3

Spin-Gläser

Einleitung

Die theoretische Beschreibung der Spingläser wird in der gegenwärtigen Literatur /1-15/ kontrovers diskutiert. In ihrer grundlegenden Arbeit nahmen Edwards und Anderson an, daß der eingefrorene Zustand der Spingläser durch einen von Null verschiedenen Ordnungsparameter $q = \{\langle S_i \rangle^2\}_{av}$ charakterisiert ist. Dabei bedeutet $\{\dots\}_{av}$ die Mittelung über die "quenched disorder". Das "Einfrieren" der Spins bei einer Einfrier-Temperatur T_f wäre dann ein Phasenübergang analog denen, die im thermischen Gleichgewicht auftreten. Dieses Verhalten glaubt man wenigstens in der Mean-Field-Theorie zu erkennen, obwohl eine Mean-Field-Theorie für langreichweitige "Random-disorder" nach wie vor umstritten ist /2-7/. Jedoch hat sich mittlerweile herausgestellt, daß die Mean-Field-Voraussagen nicht mit den bisher gemachten Experimenten übereinstimmen /8/. Aus diesem Grunde ist es notwendig, besser als mit der Mean-Field-Approximation zu rechnen. Zur Zeit besteht in der Literatur keine Übereinstimmung über das Verhalten der Spingläser.

i) Monte Carlo-Rechnungen an Ising-Modellen mit konkurrierender anti- bzw. ferromagnetischer Wechselwirkung (" \pm J-Modell") /12, 13/ oder gaußverteilter Kopplung ("Gauß-Modell") /9-11/ wurden zuerst als Unterstützung der Hypothese von Edwards-Anderson angesehen. Die anomal langsamen Relaxationsphänomene, die in den Simulationsrechnungen /9-11, 14/ auftraten, wurden dann als numerische Evidenz gegen einen Edwards-Anderson-Übergang gewertet /14/. Es tauchten jedoch Argumente /15-17/ auf, daß die Interpretation in Ref. 14 nicht schlüssig ist. Das vielleicht stärkste Argument ist die Ähnlichkeit des aufgetretenen Relaxations-Verhaltens mit dem in fünf Dimensionen, wo ein Edwards-Anderson-Übergang allgemein akzeptiert ist. Aus der Sicht einiger Arbeiten /16, 18-21/ erscheint es plausibel, daß die bisher gemachten Rechnungen wegen der zu kurzen Beobachtungszeiten nicht

die wirklichen Gleichgewichts-Effekte ermittelten und damit keine Aussagekraft in Bezug auf die grundlegende Fragestellung eines Phasenübergangs besitzen. Die Aufgabenstellung, die Rechenzeiten zu bestimmen, die nötig sind, um Gleichgewichtswerte in Monte-Carlo-Rechnungen für Spingläser zu ermitteln, blieb ungelöst.

ii) Renormierungsgruppen-Rechnungen erbrachten auch nur unsichere Aussagen über die unten kritische Dimension d_c , unterhalb der $T_f=0$. Ortsraum-Renormierungs-Methoden für Ising-Spin-Gläser ergaben /22,23/ $2 \leq d_c < 3$. Die Richtigkeit dieser Approximation ist jedoch etwas unsicher. Die eigentlich besser zu kontrollierenden ϵ -Entwicklungen ($\epsilon=d-d^*$, wobei d^* die obere Grenzdimension mit $d^*=6$ nach Ref. /24/ ist) beruhen indes auf dem "Replica-Trick" und einer Entwicklung nach q , die von zweifelhaftem Wert zu sein scheinen, da Instabilitäten auftreten /25,26/. Eine Version der Replica-Methode, die einige dieser Instabilitäten ausschließt, führte zu $d_c=4$, aber nach Ref. /7/ ist auch diese Methode nicht sicher. Das Resultat $d_c=4$ wird ebenfalls von Hochtemperatur-Reihenentwicklungen bestätigt; diese (relativ kurzen) Entwicklungen sind weitgehend irregulär und deshalb schwer zu analysieren /29/. Es ist noch hinzuzufügen, daß die "Suszeptibilität" $\chi_{EA} = k_B T \sum_R \{ \langle S_O S_R \rangle^2 \}_{av}$ endlich bleiben könnte und dennoch ein Spin-Glas-Übergang auftreten kann /15/.

iii) Eine dritte Methode beruht auf dem Studium der Grundzustände, die dadurch identifiziert werden können, daß eine gewisse Konzentration von Bonds "frustriert" sind /30/, und aufgrund dieser Eigenschaft eine genaue Analyse tiefliegender Zustände möglich ist. Diese Methode ist besonders dazu geeignet, das Verschwinden des ferromagnetischen Grundzustands bei zunehmender Konzentration anti-ferromagnetischer Bindungen zu bestimmen /31-32,12/. Zusätzlich findet man, daß sogar für $d=2$ im Grundzustand große Pakete von "solidary spins" existieren, d.h. Spins, die zueinander immer die gleiche Orientierung haben /32,33/. Da sich diese Pakete gegenseitig überlappen, erscheint die Aussagekraft dieser Beobachtung für die Frage nach einem

Phasenübergang als noch nicht endgültig geklärt /33/. Auch die Aussage, daß in Spin-Gläsern für $d=2,3$ die Grundflächen-Energie bei $T=0$ verschwindet /34/, läßt keine endgültige Klärung der Fragestellung zu /35/. Zum Schluß bemerken wir, daß auch Rechnungen, in denen der Frustrations-Effekt als äußeres Feld in Kontinuums-Rechnungen /36,37/ einging, dieses Problem nicht lösen konnten: Auf der einen Seite erhält man einen Fixpunkt, der einem Übergang zu einer Ordnung, die der des Mattis-Spinglases /38/ entspricht, zugeordnet ist, sich aber unterhalb $d_c=4$ als unstabil gegenüber dem Frustrations-Effekt erweist. Auf der anderen Seite nahm man an, daß für Heisenberg-Spingläser $d_c=3$ /36/, und daß für den Ising-Fall das gleiche Resultat zutrifft /39/, bzw. d_c sogar tiefer liegt /22/. Es sei noch bemerkt, daß bei $T=0$ und $d=2$ ein Übergang Paramagnetismus-Spinglas in Reihenentwicklungen für verdünnte Spingläser /41/ identifiziert wurde.

In der vorliegenden Arbeit soll nun ein Beitrag zur Klärung einiger der oben aufgetretenen Fragen geleistet werden, indem die statistische Mechanik zweidimensionaler Ising-Spingläser sorgfältiger untersucht wird. In Kapitel 1 erfolgte die Beschreibung einer Methode, die es erlaubt, die freie Energie von $L \times L$ -Gittern ($L \leq 18$) numerisch exakt zu berechnen. Eine Erweiterung dieser Methode wird zur Berechnung von Korrelationsfunktionen angewendet (Kapitel 1a). In Kapitel 2 wurden Methoden zur Identifizierung von Grundzuständen beschrieben, deren Kenntnis sich für die Beantwortung der Frage nach einer Spinglas-Ordnung als äußerst wertvoll erwies. In Kapitel 3 werden nun die numerischen Resultate der mithilfe der aufgezeigten Methoden durchgeführten Rechnungen, erläutert. Ein Vergleich mit analog durchgeführten Monte-Carlo-Rechnungen erlaubt Gleichgewichts- von Nichtgleichgewichts-Effekten zu unterscheiden. Gleichzeitig ist es möglich, Beobachtungszeiten, die notwendig sind, um Gleichgewichtszustände zu erreichen, wenigstens ungefähr abzuschätzen.

Eine Extrapolation der für verschiedene L berechneten Ergebnisse zu $L \rightarrow \infty$ erlaubt es, den Schluß zu ziehen, daß weder " $\pm J$ -" noch


"Gauß-Modell" in zwei Dimensionen einen von Null verschiedenen Ordnungsparameter für $T > 0$ besitzen. In beiden Fällen tritt jedoch bei $T = 0$ ein Übergang auf. Im gleichen Kapitel schließen sich noch Rechnungen für das "+ J-Modell" für verschiedene Konzentrationen negativer Bindungen an. Im Anschluß an dieses Kapitel befindet sich die Diskussion der Resultate.

KAPITEL 3

Numerische Resultate zu den Spin-Gläsern

Im folgenden Kapitel werden die numerischen Resultate von Monte-Carlo- und exakter "Transfermatrix"-Methode einander gegenübergestellt und Schlüsse über das thermodynamische Verhalten der beiden Spin-Glas-Modelle gezogen. Grundsätzlich werden zeitabhängiges Verhalten der relevanten Größen mit Monte-Carlo- und systemgrößenabhängiges Verhalten mit der "Transfermatrix-Methode" untersucht. Ein wichtiger technischer Punkt vorab: die Wahl der Bond-Konfigurationen: um statistisch voneinander unabhängige Konfigurationen zu erhalten, über die nachher gemittelt wird, werden diese mit dem Random-Generator des Computers erzeugt. Restriktionen, die für $N \rightarrow \infty$ im jeweiligen Modell gelten, werden auch für die endlichen Systeme realisiert. D.h. eine generierte Konfiguration wird auf diese Restriktionen überprüft und gegebenenfalls verworfen.

Im $\pm J$ -Modell sind dies: $\sum_{ij} J_{ij} = 0$ und $\{\phi_i\} = \frac{1}{2}$, die Kon-

zentration der frustrierten Plaketten, d.h. 

Für $x < \frac{1}{2}$, d.h. Verkleinerung der Konzentration negativer Bonds, folgt für $N \rightarrow \infty$ durch einfaches Zusammensetzen der Wahrscheinlichkeiten für x_F , die Konzentration frustrierter Plaketten:

$$x_F = 4 \cdot x \cdot (1-x) \cdot \{x^2 + (1-x)^2\}$$

Diese Restriktion wurde ebenfalls überprüft, wobei noch zu erwähnen ist, daß wegen der natürlichen Zahlen für die Anzahl der Bonds Auf- und Abrundungen notwendig waren.

Für das "Gauß-Modell" wurden folgende Mittelwerte überprüft:

$$\{ \Delta f / k_B T \}_{av} = 0 \quad \{ (\Delta f / k_B T)^4 \}_{av} = 3$$

$$\{ (\Delta f / k_B T)^2 \}_{av} = 1$$

und eine Genauigkeit bis zu 3% verlangt. Die Konzentration der frustrierten Plaketten $\{\phi_i\} = \frac{1}{2}$ wurde ebenfalls überprüft. Sie stellte sich in beiden Modellen als bestimmender Faktor heraus, was auch nach Ref. 14 zu erwarten war.

Kapitel 3a)

Ordnungsparameter ψ^2

Wegen der Endlichkeit der verwendeten Gitter und der damit fehlenden Symmetriebrechung, ist es in den exakten Rechnungen nicht möglich, $\psi = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle_0 \langle S_i \rangle_T$ direkt zu berechnen, da $\psi=0$ für $N \rightarrow \infty$.

Dagegen ist $\langle \psi^2 \rangle \neq 0$ mit

$$\begin{aligned} \langle \psi^2 \rangle &= \frac{1}{N_G} \sum_{\ell=1}^{N_G} \psi_\ell^2 = \sum_{i,j} \langle s_i s_j \rangle_0 \langle s_i s_j \rangle_T / N^2 \equiv \\ &\equiv k_B T \chi_\psi / N \end{aligned} \quad (3.1)$$

wobei N_G die Anzahl der Grundzustände $\{S_i^\ell\}$ ist mit

$$\psi_\ell^2 = \sum_{i,j} \langle s_i^\ell s_j^\ell \rangle_0 \langle s_i s_j \rangle_T / N^2 \quad (3.1a)$$

Von Gleichung (3.1) läßt sich der Schluß ziehen, daß sogar für einen idealen Paramagneten, d.h. ohne jegliche Korrelation wegen der Selbstterme gilt $\chi_\psi = 1/k_B T$ und damit $\langle \psi^2 \rangle = 1/N$.

Bei Auftreten von Korrelationen kann χ_ψ so anwachsen, daß $\langle \psi^2 \rangle$ von der Größenordnung 1 für kleine Systeme wird. Im Falle, daß ein Ordnungsparameter existiert, haben wir somit

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (k_B T \chi_\psi) = N \cdot \langle \psi \rangle^2 \quad (3.1b)$$

während im Falle eines Phasenübergangs bei T_c ohne Ordnungsparameter, aber mit unendlicher Korrelationslänge unterhalb T_c anzunehmen ist, daß die Summen in (3.1) für $N \rightarrow \infty$ dennoch divergieren.

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (k_B T \chi_\psi) \sim N^x, \quad 0 < x < 1 \quad (3.1c)$$

Daher kann die Größenabhängigkeit von $\langle \psi^2 \rangle$ Aufschluß über die Existenz eines Ordnungsparameters geben. In (3.1) bedeuten $\langle S_i S_j \rangle_0$ die Korrelation der beiden Spins im Grundzustand, $\langle S_i S_j \rangle_T$ bei der Temperatur T. Im \pm J-Modell liegt eine hohe Entartung des Grundzustandes vor, deshalb müßte über alle Grundzustände gemittelt werden. Die gemachten Rechnungen zeigen aber, daß $\langle \psi^2 \rangle$ weitaus mehr von der jeweils gewählten Random-Bond-Konfiguration abhängt, als vom vorliegenden Grundzustand. Deshalb wurde in den meisten Gittern nur auf einen Grundzustand projiziert, also $\langle S_i S_j \rangle_0$ durch ein spezielles $\langle S_i^{(\ell)} S_j^{(\ell)} \rangle_{T=0}$ ersetzt. Der dabei gemachte Fehler ist wie oben erwähnt klein gegen den bei der Mittelung über "repräsentative" Random-Konfigurationen entstehenden Fehler.

In Monte-Carlo-Rechnungen erhält man ψ^ℓ ebenfalls von einem (ℓ -ten) Grundzustand $\{S_i^{(\ell)}\}$. Das System wird in diesem Grundzustand gestartet und das zeitliche Mittel von

$$\psi_\ell^2(t) = \left\{ \sum_i S_i^{(\ell)} S_i(t) / N \right\}^2 \quad (3.2)$$

berechnet.

In den exakten Rechnungen erhält man $\psi_\ell^2 = k_B T \chi_\psi^{\ell\ell} / N$, indem man ein Feld $H_\psi^{(\ell)}$, dessen Richtung in jedem Punkt durch $\{S_i^{(\ell)}\}$ gegeben ist, an das Gitter anlegt.

Durch die zweite Ableitung der freien Energie erhält man

$$\chi_\psi^{\ell\ell} = \frac{\partial^2 F}{\partial \{H_\psi^{(\ell)}\}^2} \quad (3.3)$$

Die Monte Carlo-Rechnungen überschätzen den Wert für ψ^2 bei kleinem T wie Fig. (3.1) zeigt. Offensichtlich werden bei größeren Distanzen $\vec{r}_i - \vec{r}_j$ zu große Werte für $\langle S_i S_j \rangle_T$ berechnet, da das System in einem energetisch günstigen Tal im Konfigurationsraum (nahe dem "Start"-Grundzustand $\{S_i^{(\ell)}\}$) für lange Zeit bleibt, und es nicht schafft, die umgebenden Energiebarrieren

zu überspringen. Eine Vergrößerung der Observationszeit t führt zu keiner Änderung der Resultate, d.h. das System bleibt im selben Tal. Aus diesem Grunde können Monte Carlo-Resultate für beide ψ^2 und $q(t) = \sum_i \langle S_i(t) \rangle^2 / N$ nicht das Gleichgewichtsverhalten eines unendlichen Systems wiedergeben. Werte für $q(t)$ enthält Fig. (3.1). Der hohe Wert für tiefe Temperaturen erklärt sich daraus, daß $q(t)$ eine relative Ordnung mißt, die dadurch gegeben ist, daß das System wie gesagt in dem einen Konfigurationstal bleibt. Fig. (3.1a) zeigt ein Einfrieren bei einer Temperatur $k_B T/J \approx 1.3 \pm 0.1$ in Übereinstimmung mit Ref. /12/. Die geschilderten Zeitabhängigkeiten der Resultate werden in Kapitel 3c) noch genauer untersucht, besonders im Hinblick auf experimentelle Untersuchungen.

Wichtiges Resultat der exakten Rechnungen zum " \pm J-Modell" ist das Verhalten des Ordnungsparameters ψ^2 für zunehmende Systemgröße (Fig. (3.2)).

In einem Mattis-Spin-Glas

$$-\beta \mathcal{H} = J \sum_{i,j} \epsilon_i \epsilon_j s_i s_j \quad (3.4)$$

oder einem äquivalenten Ising-Ferromagneten, erreicht ψ^2 schnell das Quadrat des Ordnungsparameters des unendlichen Systems, wenn N anwächst (Fig. (3.2)).

Dagegen wird ψ^2 zusehends kleiner für das \pm J-Modell, wenn N größer wird. Der Sättigungswert $\psi^2(T=0)$ fällt so stark ab, daß wir annehmen, daß

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \psi^2(T=0) = 0 \quad (3.5)$$

d.h. keine Spin-Glas-Ordnung sogar im Grundzustand. Andererseits unterscheidet sich das System auch von einem normalen Paramagneten für den $\psi^2 \equiv 1/N$ gilt.

Die Frage, ob die Korrelationen $\langle S_i S_j \rangle^2$ im Grundzustand für $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \rightarrow \infty$ einem Potenzgesetz oder einem exponentiellen Abfall gehorchen, läßt sich mit den Daten für ψ^2 nicht beantworten. Auf diese Frage kommen wir aber in Kapitel 3b) zurück.

Darüberhinaus geben die Wendepunkte der Kurven in Fig. (3.2) eine Abschätzung für T_c . Diese Wendepunkte liegen für anwachsende Systemgröße N bei tieferen Temperaturen T , so daß auf $T_c=0$ für $d=2$ geschlossen werden kann. Für höhere Dimensionen d verbietet sich ein solcher Schluß, da Monte-Carlo-Resultate für alle d ($2 \leq d \leq 5$) einen schwachen Abfall bei $q(t)$ mit der Observationszeit und bei ψ^2 einen starken Abfall mit der Temperatur zeigen. Dies könnte auf einen Übergang im Verhalten der Korrelationen $\langle S_i S_j \rangle$ bei höheren Dimensionen hindeuten.

Ordnungsparameter im "Gauß-Modell"

Das Verhalten des Ordnungsparameters ψ^2 zeigt einen wichtigen Unterschied: ψ^2 erreicht 1 für $T \rightarrow 0$ für alle L , Fig. (3.3), zeigt jedoch ein charakteristisches Durchhängen der Kurve, das mit größer werdendem L noch zunimmt. Das legt den Schluß nahe, daß für $T > 0$ der Ordnungsparameter verschwindet.

Man kann also abschließend feststellen, daß weder das " \pm J-" noch das "Gauß-Modell" bei endlicher Temperatur einen von Null verschiedenen Ordnungsparameter besitzen. Dies gilt für das " \pm J-Modell" sogar im Falle von $T=0$, während im "Gauß-Modell" $\psi^2 \equiv 1$ für $T=0$.

Im " \pm J-Modell" bedeutet dies, daß auch der Edwards-Anderson-Ordnungsparameter

$$q = \frac{1}{N} \left\{ \sum_i \langle S_i \rangle_T^2 \right\}_{av} \quad (3.6)$$

für $T=0$ verschwindet.

Man nehme an, q sei verschieden Null, dann ist dies nur möglich, falls ein endlicher Teil von Spins am Ort i mit $\langle S_i^2 \rangle_T > 0$ in jeder Bond-Konfiguration $\{J_{ij}\}$ existieren. Dann gibt es wieder einen endlichen Anteil der N^2 Paare $(\langle S_i \rangle_T, \langle S_j \rangle_T)^2$, die dann von Null verschieden sind.

Wir haben damit die folgende Identität für $N \rightarrow \infty$.

$$\begin{aligned}
 q^2 &= \left\{ \frac{1}{N} \sum_i \langle s_i \rangle_T^2 \right\}_{av} \cdot \left\{ \frac{1}{N} \sum_j \langle s_j \rangle_T^2 \right\}_{av} = \\
 &= \left\{ \left(\frac{1}{N} \sum_j \langle s_j \rangle_T^2 \right)^2 \right\}_{av} = \left\{ \frac{1}{N^2} \sum_{ij} \langle s_i s_j \rangle_T^2 \right\}_{av} \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

da

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \langle s_i s_j \rangle_R^2 = \langle s_i \rangle_T \langle s_j \rangle_T$$

wobei \vec{R} der Abstand zwischen den Spins i und j ist. Im thermodynamischen Limes führen individuelle Konfigurationen $\{J_{ij}\}$ zu $q_{\{J_{ij}\}} = \frac{1}{N} \sum_i \langle s_i \rangle_T^2$, das von q nur einen minimalen Unterschied aufweist, der vernachlässigbar ist, weshalb $q^2 = \{q_{\{J_{ij}\}}^2\}_{av}$ gilt.

Man sieht also, daß für $T=0$ Gleichung (3.1) und (3.7) auf der rechten Seite identisch werden, d.h. $q_{(T=0)} = \psi_{(T=0)}$.

Kapitel 3b)

Korrelationsfunktionen

Während die Daten klar die Richtigkeit von Gl. (3.1b) zeigen, ist es weitaus schwieriger zu entscheiden, ob χ_ψ in Gl. (3.1) endlich ist und damit $\{\langle \psi^2 \rangle\}_{av} \propto 1/N$, oder ob Gl. (3.1c), d.h. potentieller Zusammenhang mit der Systemgröße N , richtig ist. Wenn die Korrelationslänge ξ_ψ endlich ist, erwartet man, daß ξ_ψ von N unabhängig wird, wenn L ($N=L \times L$) ξ_ψ deutlich übersteigt. Diese Frage läßt sich klarer entscheiden, wenn χ_ψ aufgezeichnet wird, im Gegensatz zu $\{\langle \psi^2 \rangle\}_{av}$ (Fig. 3.4) und (Fig. 3.5). Für das "± J-Modell" (Fig. 3.4) zeigt sich, daß die Kurven fast identisch sind bis herab zu $k_B T/J = 1.3$, die "kritische" Temperatur der Monte-Carlo-Rechnungen.

Für $k_B T/J > 0.7$ sind nur die Daten für $L=12, 16$ identisch, während χ_ψ für $L=6$ deutlich kleiner ist. Man kann also schließen, daß für $k_B T/J = 1.3 \xi_\psi$ kleiner als 6 Gittereinheiten und kleiner als 12 für $k_B T/J = 0.7$ ist. Man hat somit ein Anwachsen der Korrelationslänge, die (vielleicht) bei $T=0$ divergiert. Eine Evidenz, daß χ_ψ tatsächlich unendlich groß ist für $T=0$, ist durch die systematischen Reihenentwicklungen in Ref. 41 gegeben.

Während $\chi_\psi = \chi_{EA}$ bei $T=0$ mit

$$\chi_{EA} = \frac{1}{N} \left\{ \sum_{i,j} \langle s_i s_j \rangle_T^2 \right\} \quad (3.8)$$

stimmt diese Relation nicht mehr für $T > 0$. Es ist nicht auszuschließen, daß $\langle s_i s_j \rangle_T^2$ langreichweitig ist, während $\langle s_i s_j \rangle_0 < \langle s_i s_j \rangle_T$ dies nicht ist /50/. In dem Falle, daß ein Ordnungsparameter existiert, würde das bedeuten, daß der "Zustandsvektor" in der geordneten Phase im Phasenraum die "Richtung ändert", wenn die Temperatur erhöht wird. Ein solches Verhalten tritt im "helicalen Magneten" auf /51/. Eine gewisse Evidenz für ein solches Verhalten trat bei Mean-Field-Rechnungen für Spin-Gläser auf /4/. Es ist daher sehr wichtig, das Verhalten der Korrelation $\langle s_i s_j \rangle_T^2$ direkt zu betrachten. Dazu wird die Methode aus Kapitel 1a) herangezogen. Hier zuerst die Resultate für das "+ J-Modell": Die Korrelation $\langle s_i s_j \rangle_T^2$ wird in log-log-Darstellung in (Fig. 3.6) gezeigt. Bei der tiefsten Temperatur (etwa 15% der kritischen Temperatur in Monte-Carlo-Rechnungen (Fig. 3.2)) liegen die Daten in einer Geraden, die ein Potenzgesetz anzeigt

$$\left\{ \langle s_i s_j \rangle_{T=0}^2 \right\}_{av} \sim R^{-p}, \quad R \rightarrow \infty \quad (3.9)$$

mit $p = 0.4 \pm 0.1$. Bei $k_B T/J = 0.5$ (etwa 38% des $M_C - T_f$) zeigt sich ein gleiches Verhalten für kleinere Abstände, während man für größere Abstände einen deutlichen Crossover zu einem schnelleren Abfall erkennt. In halblogarithmischer Darstellung (Fig. 3.7) ist klar erkennbar, daß die Daten für $k_B T/J = 0.5, 0.8$ mit einem exponentiellen Abfall konsistent sind.

$$\{ \langle s_i s_j \rangle_T^2 \} \propto \exp \{ - R / \xi_{EA} \} \cdot R \rightarrow \infty \quad (3.10)$$

Das davon verschiedene Verhalten für $k_B T/J = 0.2$ könnte einen Phasenübergang von einem exponentiellen zu einem Potenzabfall anzeigen für eine Temperatur $k_B T_c/J$ zwischen 0.2 und 0.5, analog zum XY-Modell /52/.

Diese Möglichkeit ist aber aus den folgenden Gründen unwahrscheinlich.

Die Daten für χ_ψ haben bereits angezeigt, daß die Korrelationslänge ξ_ψ eine Größenordnung von etwa 10 Gittereinheiten bei $k_B T/J \approx 0.7$ annimmt und stetig anwächst mit abnehmender Temperatur. Nach Gl. (3.9) ist für $\xi_{EA} \approx \frac{1}{2} \xi_\psi$ zu erwarten, und damit ist bei $k_B T/J = 0.2$ $\xi_{EA} \gg L$. Deshalb erwarten wir für die noch berechenbaren Abstände $|\vec{r}_{ij}|$ keinen Effekt, der auf einen exponentiellen Abfall schließen läßt Gl. (3.10). Der Crossover von Gl. (3.9) zu (3.10) findet in (Fig. 3.6) bei weitgrößeren als den berechenbaren Abständen statt. Wenn ein Phasenübergang von Gl. (3.9) zu (3.10) auftreten würde, läge dieser bei etwa 1/10 der Übergangstemperatur des Mattis-Spin-glasses!

Zum Schluß zeigen wir noch die Relation der Exponenten x und p definiert in Gl. (3.1c) und (3.9). Da χ_ψ für $N \rightarrow \infty$ divergiert, kann man die Summen durch Integrale über das Volumen V des Systems ersetzen.

$$\begin{aligned} \{ \langle \psi^2 \rangle \}_{av} &= \frac{1}{N} \int_V d\vec{r}_{ij} \{ \langle s_i s_j \rangle_0^2 \}_{av} \propto \\ &\propto \frac{1}{N} \int_0^{\sqrt{N}} r^{1-p} dr \propto N^{-p/2} \end{aligned} \quad (3.11)$$

und damit $x = p/2$.

Das Verhalten hier ist von der gleichen Art wie im (völlig frustrierten) Ising-Antiferromagneten auf dem Dreiecks-Gitter /53/. In diesem Fall aber ist $p=1$.

Im "Gauß-Modell" ist die Korrelationsfunktion konsistent mit einem exponentiellen Abfall bei allen betrachteten Temperaturen (Fig. 3.8) und (Fig. 3.9). Wegen der Identität von q und ψ bei $T=0$ schließen wir, daß der Edwards-Anderson-Ordnungsparameter für $T \neq 0$ gleich Null ist, obwohl er bei $T=0$ den Wert 1 erreicht. Wiederum ist es aber nicht möglich zu klären, ob Gl. (3.9) oder (3.10) bei sehr tiefen Temperaturen verifiziert wird. Allerdings zeigt sich bei Temperaturen von etwa 20% der bei Monte-Carlo-Rechnungen auftretenden kritischen Temperatur ein exponentieller Abfall. Von Fig. (3.5) ausgehend erwarten wir aber, daß bei unserer tiefsten Temperatur die Korrelationslänge ξ_{EA} bei weitem die größtmöglichen L 's unserer Rechnungen übersteigt. Deshalb müssen weitaus größere Systeme herangezogen werden, um einen exponentiellen Abfall genau zu bestätigen. Unsere Daten erklären frühere Arbeiten von Reed /55/, wo Onsagers /46/ exakte Lösung für das Ising-Modell für den Fall von sich periodisch wiederholenden $L \times L$ -Zellen mit beliebiger Kopplung verallgemeinert wurde ($L \leq 5$). Er findet, daß die Temperatur, bei der die Singularität in der spezifischen Wärme auftritt, stark mit zunehmendem L abnimmt. Seine numerischen Resultate sind kaum mit einem Übergang für $L \rightarrow \infty$ bei $k_B T/J = 1.0$ in Einklang zu bringen, obwohl er einen Übergang bei sehr viel tieferen Temperaturen nicht ausschließen kann. Daher schließen wir, daß der in Monte-Carlo-Rechnungen auftretende Übergang in 2-d Ising-Spinnlängern ein Beobachtungszeit-Effekt ist, bemerken aber, daß Monte-Carlo-Evidenz gegen diesen Übergang /15,16/ sehr zweifelhaft ist und Vorsicht geboten ist, bei Schlüssen in höheren Dimensionen.

Fig. (3.10) zeigt die Temperaturabhängigkeit der Korrelationslänge ξ_{EA} , die aus den Resultaten in (Fig. 3.7) und (Fig. 3.9) abgeleitet wurde. Die Resultate sind konsistent mit einer Divergenz der Korrelationslänge für $T \rightarrow 0$.

Definiert man eine Korrelationslänge $\xi_{EA}^2 = \sum_{ij} R^2 \{ \langle S_i S_j \rangle_{av}^2 / (N k_B T \xi_{EA})$ durch das zweite Moment der Korrelationsfunktion, so erhält man für ein Gitter mit der Koordinationszahl Z in führender Ordnung in der Hochtemperaturentwicklung

Für das "+ J-Modell" erhält man einfach $\xi_{EA} \approx 2J/k_B T$ und für das "Gauß-Modell" $\xi_{EA} \approx 2\Delta J/k_B T$. Der Vergleich mit den "Transfermatrix"-Resultaten in Fig. (3.10) ergibt eine gute Übereinstimmung im Hochtemperaturbereich. Höhere Ordnungen in der HT-Entwicklung sind nach Ref. /28,29/ sehr schwer zu berechnen. Die Fig. (3.10) enthält auch einen Vergleich mit dem 1-d Mattis-Modell, das keinen Phasenübergang zeigt.

Kapitel 3c)

Monte-Carlo-Resultate im Vergleich mit exakten Resultaten

Für das "+ J-Modell" wurden Monte-Carlo-Rechnungen an genau dem gleichen Gitter (d.h. gleiche Random-Bond-Konfiguration) vorgenommen, an dem exakte Resultate berechnet wurden. (Fig. 3.11) zeigt die innere Energie U normiert per Bond ($E = 2U$, und damit für periodische Randbedingungen und/oder unendliche Systeme ist E die innere Energie normiert per Spin). Monte-Carlo-Resultate für genau das gleiche Gitter sind eingezeichnet. Solange die Monte-Carlo-Rechnungen nun von einem Grundzustand gestartet werden, den man durch die exakten Rechnungen kennt, zeigt sich, daß die Energie ihren Gleichgewichtswert bei einer Beobachtungszeit von 20 000 MCS/Spin erreicht. Der gleiche Effekt liegt bei $k_B T/J \gtrsim 0.8$ vor, wenn das System von einer Random-Konfiguration gestartet wird. Für $k_B T/J \lesssim$ ist die Abweichung der inneren Energie von ihrem Gleichgewichtswert ziemlich stark ausgeprägt.

In der Literatur /11,12,15,16,18,20,33,36/ fand eine ausgeprägte Diskussion der Grundzustandseigenschaften bei MC-Rechnungen statt. Wir studierten deshalb die Umstände, unter denen Grundzustände in den MC-Rechnungen erreicht wurden. Die folgende Vorgehensweise erwies sich dabei als relativ effizient: Das System wird oberhalb der in MC-Rechnungen auftretenden kritischen Temperatur (etwa $k_B T/J = 1.3-1.4$ nach Ref. /12/), d.h. $k_B T/J =$

1.8 gestartet. Von hier wird die Temperatur linear mit der Zeit reduziert bis die Temperatur Null nach einer gewissen Abkühlzeit t_c erreicht wird. Die innere Energie wird berechnet und mit dem exakten Resultat verglichen.

Die Abkühlzeit t_c , die notwendig ist, um einen Grundzustand zu erreichen, zeigt eine äußerst starke Abhängigkeit von der Systemgröße. Ein $t_c = 10^5$ MCS/Spin zeigt für ein 6x6-Gitter, daß das System nicht nur einen seiner Grundzustände erreicht, sondern darüber hinaus viele andere und sogar den "spiegelbildlichen" Grundzustand (alle Spins umgedreht) erreicht. Für 8x8 und 10x10 findet man bei gleichem t_c nicht mehr das Spiegelbild, es werden aber weiterhin eine große Anzahl an Grundzuständen erreicht. Weitaus kleinere t_c (10^3 bis 10^4 MCS/Spin) reichen aus, um wenigstens einen Grundzustand zu erreichen. Für $N=12 \times 12$ und 14×14 sind Läufe mit $t_c = 10^4$ MCS/Spin typischerweise nicht länger erfolgreich. Das System landet in einem metastabilen Zustand, dessen Gesamtenergie nur gering höher liegt (d.h. 2J) als die genaue Grundzustandsenergie. Dieser metastabile Zustand weicht aber vom wahren Grundzustand durch eine weitgehend unterschiedliche Anordnung der Cluster ab. Diese Resultate sind konsistent mit Arbeiten von Dasgupty et al. /19/ und Rammal et al. /20/. Mit $t_c = 2 \cdot 10^4 - 3 \cdot 10^4$ MCS/Spin erreicht man den Grundzustand in den meisten Fällen, so auch bei $N=16 \times 16$. Für $N=18 \times 18$ war $t_c = 2 \cdot 10^4$ nicht mehr erfolgreich, Zeiten $t_c = 3 \cdot 10^4 - 6 \cdot 10^4$ MCS/Spin waren nötig. Für größere Gitter mußten periodische Bond-Konfigurationen herangezogen werden. Für ein 24×24 -Gitter wurden drei 8×24 -Gitter nebeneinander periodisch wiederholt und die berechnete Gesamt-Energie auf das 24×24 -Gitter extrapoliert. Für dieses Gitter war eine Beobachtungszeit von $t_c = 8 \cdot 10^4$ MCS/Spin notwendig. Ein analoges 32×32 Gitter zeigte eine Abkühlzeit von $t_c = 1 \cdot 10^5 - 2 \cdot 10^5$ MCS/Spin, je nachdem, ob das System von einer Random-Konfiguration (höherer Wert) bei $k_B T/J = 1.8$ oder vom vorher erreichten Grundzustand gestartet wurde.

Es zeigt sich, daß die Energie per Bond von N kaum abhängt. Wir schätzen mit Extrapolation Fig. (3.12):

$$E(T=0)/J = - 1.41 \pm 0.01 \quad (3.12)$$

Dieses Resultat liegt nur wenig tiefer als frühere Monte-Carlo-Resultate /12,45/. Auf der Basis unserer Resultate schließen wir, daß diese MC-Rechnungen nur tiefliegende metastabile Zustände erreicht haben, die aber nur wenig oberhalb ($2J, 4J$) des wahren Grundzustands liegen. Diese metastabilen Zustände wurden in eigenen Rechnungen relativ leicht, d.h. bei mit den in /12, 45/ verwendeten Abkühlzeiten vergleichbaren Zeiten erreicht. Das Resultat von Ref. 31, wo exakte Grundzustände generiert wurden, $E(T=0) \approx -1.4$, ist in guter Übereinstimmung mit unseren Resultaten.

Fig. (3.13) zeigt die Temperaturabhängigkeit der Entropie/Spin. Während unsere Resultate für hohe Temperaturen gut mit den Monte-Carlo-Resultaten von Kirkpatrick /12/ übereinstimmen, ist unsere Grundzustandsentropie beträchtlich tiefer ($S/k_B \approx 0.075$ zu $S/k_B \approx 0.099$ bei Kirkpatrick). Das Verhalten der Energie bei Vergrößerung des Systems (Fig. 3.12) führt zu dem Schluß, daß das System sich an den beiden Rändern besser den random-verteilten Kopplungen "anpassen" kann, und damit der Frustrationseffekt weniger stark ausgeprägt ist. Somit ist zu erwarten, daß unsere Methode $S(T=0)$ etwas unterschätzt, da die Grundzustandsentartung leicht reduziert ist. Resultate von Vannimenus und Toulouse /31/ für 20×20 bis 30×30 -Gitter, die mit einer anderen Methode errechnet wurden, ergeben $S(T=0)/k_B = 0.07$, womit anzunehmen ist, daß die Monte-Carlo-Rechnungen einen zu hohen Wert angeben.

Die Zeiten, die notwendig sind, um den Einfluß der Start-Konfiguration bei tiefen Temperaturen ($k_B T/J \ll 1$) zu verlieren, sind von der gleichen Größenordnung wie t_c . Um vergleichbar gute Resultate für thermische Mittelwerte für Ordnungsparameter, Suszeptibilitäten usw. zu erreichen, sind jedoch weitaus größere Beobachtungszeiten notwendig (vergl. Fig. 3.1). Das System bleibt bei tiefen Temperaturen in nur einem Tal des Konfigurationsraumes, wie dies in Kapitel 3a) schon beschrieben wurde. (Fig. 3.14) zeigt bei $k_B T/J = 1.0$ einen Übergang von einem

Konfigurationstal zu einem anderen. Die drastische Änderung der Werte für χ und $\langle \psi^2 \rangle$ bei genau derselben Beobachtungszeit legt diesen Schluß nahe. Für weitaus tiefere Temperaturen wird ein solches Überspringen der Energiebarrieren natürlich immer unwahrscheinlicher, d.h. man muß t weitaus höher wählen als den hier bei $k_B T/J = 1.0$ notwendigen Wert von $t=8 \cdot 10^3$ MCS/Spin, der zum Überspringen von nur einer Barriere notwendig war. Die Anzahl der Grundzustände für das verwendete 16×16 -Gitter ergibt sich aus der Nullpunkts-Entropie zu $\approx 10^8$. Dies zeigt, daß bei tiefen Temperaturen mit MC geradezu astronomische Beobachtungszeiten notwendig wären, um über alle Grundzustände exakt zu mitteln.

Allerdings werden nicht alle Resultate so stark wie Ordnungsparameter, Suszeptibilitäten usw. von der Beobachtungszeit beeinflusst. (Fig. 3.15) zeigt die spezifische Wärme, deren Daten weder von der Startkonfiguration noch von der Beobachtungszeit wesentlich abhängen und mit den exakten Resultaten sehr gut übereinstimmen. Dies ist zu erwarten, da die spezifische Wärme von kurzreichweitigen Korrelationen bestimmt wird, die eine Art "lokales Gleichgewicht" sehr schnell erreichen.

Die gleichen Untersuchungen wurden auch beim "Gauß-Modell" vorgenommen.

In (Fig. 3.16) werden die exakten Resultate mit MC-Rechnungen für die innere Energie gezeigt. Wieder zeigen die MC-Werte eine gute Übereinstimmung mit den exakten Werten bei hohen Temperaturen, aber unterhalb der kritischen Temperatur T_f in den MC-Rechnungen ($k_B T_f/\Delta J \approx 1.0$ nach Ref. /9/) werden die Abweichungen immer ausgeprägter. Unsere Abschätzung für die Grundzustandsenergie liegt bei

$$E(T=0)/J = - 1.31 \pm 0.01 \quad (3.13)$$

Sie liegt deutlich tiefer als frühere Werte $E(T=0)/J=-1.25/15,19/$. Unsere Methode zur Generierung von Grundzuständen funktioniert ebenfalls, allerdings ist der Aufwand im "Gauß-Modell" weitaus größer, da nur ein Grundzustand (+ Spiegel-

bild) existiert, und viele metastabile Zustände mit nur wenig höherer Energie hinzukommen. Dieses Resultat war jedoch zu erwarten: für ein endliches Gitter haben wir eine endliche Anzahl (hier: $2L^2-L$) von Kopplungs-Konstanten $\{J_{ij}\}$ entsprechend der Gauß-Verteilung. Die Energie ist eine lineare Kombination dieser $2L^2-L$ Werte bei jeder Spin-Konfiguration, wo wegen des paarweisen Charakters der Wechselwirkung (und $S_i = \pm 1$) die gleiche Linearkombination für $S_i \rightarrow -S_i$, also für das Spiegelbild, auftritt. Auf der anderen Seite hat die Wahrscheinlichkeit, daß zwei verschiedene Spin-Konfigurationen die gleiche Energie haben, das Maß Null. Im thermodynamischen Limes kann eine höhere Entartung auftreten, wenn tiefliegende Zustände an den Grundzustand heranreichen.

Fig. (3.17) zeigt die Temperaturabhängigkeit der Entropie im "Gauß-Modell". Da der Grundzustand zweifach entartet ist, erwarten wir $S(T=0)/k_B = \ln 2/N$. Die Daten sind konsistent mit diesem Verhalten. Läßt man diesen "Finite-Size-Effekt" außer acht, so findet man, daß die Entropie über einen weiteren Temperaturbereich eine lineare Abhängigkeit zeigt, $S(T)k_B \approx 0.3 k_B T/\Delta J$. Da $dS/d(k_B T/\Delta J) = C\Delta J/k_B T$ ergibt sich aus dem obigen Resultat ebenfalls eine lineare Abhängigkeit der spezifischen Wärme C bei tiefen Temperaturen, die schon in den direkten Resultaten beobachtet wurde (vgl. Fig. (3.15)). Wegen dieser geringen Entartung ist das Verhalten des Ordnungsparameters stark unterschieden von dem des $\pm J$ -Modells (vgl. Fig. 3.3). Obwohl insgesamt 16 Realisierungen der 16×16 -Gitter generiert wurden, gelang es nur zwei Grundzustände zu erreichen, weshalb diese Kurve nicht eingezeichnet wurde. Es ist allerdings interessant, daß sogar die 34×34 Monte-Carlo-Resultate /11/, wo sicherlich nicht die Projektion auf den Grundzustand, sondern die auf metastabile Zustände berechnet wurde, sehr gut in dieses Bild passen. Wie oben schon erwähnt, zeigt sich ein systematischer Trend in den Resultaten mit zunehmender Systemgröße, die wegen der großen statistischen Fluktuationen und der Beobachtungszeitabhängigkeit in früheren MC-Rechnungen /11,15/ nicht erkannt wurden. Aus Figur 3.5 erhält man für die

kritische Temperatur der MC-Rechnungen $k_B T_f / \Delta J \approx 1.0$ eine Korrelationslänge $\xi_\psi \approx 6$.

Fig. (3.10) zeigt die Temperaturabhängigkeit der Korrelationslänge ξ_{EA} , die aus den Resultaten in (Fig. 3.7) und (Fig. 3.9) abgeleitet wurde. Die Resultate sind konsistent mit einer Divergenz der Korrelationslänge für $T \rightarrow 0$. Definiert man eine Korrelationslänge

$$(3.14)$$

durch das zweite Moment der Korrelationsfunktion, so erhält man für ein Gitter mit der Koordinationszahl Z in führender Ordnung in der Hochtemperaturentwicklung $\xi_{EA} \approx \sqrt{Z} \frac{1}{k_B T} \sqrt{\{J^2\}_{av}}$.

Für das "+ J-Modell" erhält man einfach $\xi_{EA} \approx 2\Delta J / k_B T$. Der Vergleich mit den "Transfermatrix"-Resultaten in Fig. (3.10) ergibt eine gute Übereinstimmung im Hochtemperaturbereich. Höhere Ordnungen in der HT-Entwicklung sind nach Ref. /28,29/ sehr schwer zu berechnen. Die Fig. (3.10) enthält auch einen Vergleich mit dem 1-d-Mattis-Modell, das keinen Phasenübergang zeigt.

Fig. (3.18) zeigt analog zum "+ J-Modell" eine gute Übereinstimmung der MC-Werte für die spezifische Wärme mit den exakten Resultaten, obwohl auch hier die Ordnungseffekte in den MC-Rechnungen überschätzt werden. Wie zu erwarten, spielt die Systemgröße analog zum "+ J-Modell" auch hier keine Rolle. Wir erwarten eine gewisse systematische Größenabhängigkeit bei sehr tiefen Temperaturen, wegen der nur zweifachen Entartung der Energieniveaus (wie oben gezeigt).

Das erste höherliegende Energieniveau differiert vom Grundzustand nur durch einen kleinen aber endlichen Wert ($c \propto 1/\sqrt{N}$), weshalb die spezifische Wärme sich nach einem exponentiellen Gesetz verhalten muß $C/k_B \propto \exp\{-cE(T=0)/k_B T\}$. Im thermodynamischen Limes wird das Gap verschwinden, und die spezifische Wärme wird sich nach einem Potenzgesetz verhalten $C/k_B \propto T^Y$. Die numerischen Resultate von (Fig. 3.15) lassen

eine lineare Abhängigkeit ($y=1$) erwarten, was in Übereinstimmung mit dem Experiment /8,54/ ist. Im "+ J-Modell" liegen die Energieniveaus immer in Schritten vom ganzzahligen Vielfachen von J , so daß ein exponentielles Gesetz für C für $N \rightarrow \infty$ existieren muß.

Die unterschiedliche Abhängigkeit der spezifischen Wärme und des Ordnungsparameters bzw. der Suszeptibilitäten von der Beobachtungszeit lassen den Schluß zu, daß wegen der äußerst langen Zeiten für den Ordnungsparameter, dessen Gleichgewichtsverhalten im Experiment nur schwer zu beobachten sein wird, während ein Vergleich der spezifischen Wärmen sinnvoll erscheint.

Kapitel 3d)

Das asymmetrische "+ J-Modell" und der Übergang zur ferromagnetischen Phase

Im asymmetrischen "+ J-Modell" ist es sinnvoll, die ferromagnetische Suszeptibilität $k_B T \chi_f = k_B T \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \sum_{i,j} \{ \langle S_i S_j \rangle \}_{av} / N$ zu untersuchen. Im genau symmetrischen "+ J-Modell" erhält man das triviale Resultat $\chi_f = 1/k_B T$. Fig. 3.19 zeigt unsere numerischen Resultate für einige Konzentrationen antiferromagnetischer Bonds x . Es zeigt sich, daß $k_B T \chi_f$ monoton sowohl mit der Temperatur als auch mit der Konzentration x absinkt. Innerhalb der Genauigkeit unserer Resultate ist keine Evidenz für einen zweifachen Übergang Paramagnet \rightarrow Ferromagnet \rightarrow Spinglas (oder Paramagnet?) zu erkennen, während ein solcher Übergang in einigen experimentellen Systemen auftrat. In Fig. (3.19) tritt nur der Übergang Paramagnet-Ferromagnet auf. Eine genauere Abschätzung verlangt jedoch eine genaue Analyse der Systemgrößenabhängigkeit. Fig. (3.20) zeigt die Konzentrationsabhängigkeit von $k_B T \chi_f$ bei $k_B T/J = 0.2$. Nach Fig. (3.19) stimmen diese Resultate mit denen im Grundzustand überein. Es sei noch bemerkt, daß die ferromagnetische Suszeptibilität mit dem Quadrat der Magnetisierung zusammenhängt: $k_B T \chi_f / N = M^2$.

Aus Fig. (3.20) finden wir für den Übergang Ferromagnet-Paramagnet:

$x_F^C \approx 0.33 \pm 0.03$ für die Konzentration der frustrierten Plaketten und damit für die Konzentration negativer Bonds.

$$x_C \approx 0.12 \pm 0.015$$

Dieses Resultat liegt im Bereich früherer Abschätzungen ($x_C \approx 0.1$ /32/; $x_C = 0.145 \pm 0.005$ /33/; $x_C \approx 0.15$ /45/; $x_C \approx 0.15 - 0.2$ /12/). Das resultierende Phasendiagramm (Fig. (3.21)) ist damit qualitativ gleich dem von Young /56/ mithilfe von Real-space-Renormierungsgruppen-Rechnungen ermittelten.

Fig. (3.22) analysiert das Verhalten der spezifischen Wärme. Es zeigt sich, daß die Position des Maximums in der spez. Wärme nur für kleine x mit der Phasengrenze übereinstimmt. Die Divergenz der spezifischen Wärme ist vermutlich im thermodynamischen Limes nur in einem schmalen Temperaturbereich um den Übergangspunkt dominant. Ein analoges Verhalten zu dem in Ferromagneten mit nichtkonkurrierender verdünnter Wechselwirkung /57/. In einem endlichen System wird eine solche Singularität natürlich von den Rundungseffekten überdeckt. Eine breite "Background-Schottky-Anomalie" bleibt zurück, d.h. das Maximum hängt mit keinerlei Übergang zusammen). Diese Interpretation wird durch den Umstand gestützt, daß für größere x die spezifische Wärme sehr schnell das Verhalten des symmetrischen "+ J-Modells" annähert (vgl. Fig. 3.22c). Fig. (3.23) zeigt, daß das Maximum der spezifischen Wärme mit L für kleine x stetig anwächst, während für größere x ein anfängliches Ansteigen sehr bald in einen Sättigungswert übergeht. Ein Ergebnis, das wieder die Interpretation unterstützt, daß in diesem Fall der Peak von (ferromagnetischen) Clustern verursacht wird, die oberhalb des Übergangs auftreten (falls ein Übergang überhaupt auftritt).

Kapitel 3e)

Dreidimensionale Resultate

Der Speicherplatz für die dreidimensionale "Transfermatrix-Methode" steigt auf 2^{L^2} , wobei L die Kantenlänge der Grundfläche ist. Aus diesem Grunde sind numerische Rechnungen nur bis zu $L=4$ möglich. Damit scheidet die Möglichkeit aus, analog zu den 2-d Gittern das systemgrößenabhängige Verhalten etwa des Ordnungsparameters ψ^2 zu berechnen. In diesem Kapitel sind aus diesem Grunde nur einige Beispiele für Rechnungen am "J-Modell" in drei Dimensionen enthalten. Fig. (3.24) zeigt die spezifische Wärme im Vergleich zu Monte-Carlo-Rechnungen von Bray und Moore /6/. Hier zeigt sich eine etwas größere Abweichung als in zwei Dimensionen Fig. (3.15), die einerseits auf die kleinen Abmessungen des $4 \times 4 \times 4$ -Würfels zurückzuführen sind, andererseits ist möglicherweise auch an der Genauigkeit der Monte-Carlo-Rechnungen in drei Dimensionen zu zweifeln. Dennoch ergibt sich noch eine akzeptable Übereinstimmung. (Fig. 3.25) zeigt den Verlauf der inneren Energie. Die Grundzustandsenergie liegt hier bei $E_0/k_B = -1.78 \pm 0.03$. Der Punkt liegt analog zu den 2-d-Resultaten etwas tiefer als die Monte-Carlo-Ergebnisse von Kirkpatrick /11/.

Für den Ordnungsparameter ψ^2 erhält man ein zu dem 2-d-Fall analogen Resultat. Für ein 8×8 -Gitter, d.h. 64 Spins wie im 4^3 -Würfel, erhält man ebenfalls einen S-förmigen Verlauf von ψ^2 gegenüber $k_B T/J$ wie in Fig. (3.26) (Zweidimensional Fig. (3.2)). ψ^2 ist für $T=0$ wieder von 1 verschieden, was auf eine hohe Grundzustandsentartung schließen läßt. Ein ähnliches L-abhängiges Verhalten wie in zwei Dimensionen erscheint durchaus möglich.

Interessant wäre eine Untersuchung der Korrelationsfunktion $\langle S_O S_R \rangle^2$. Wegen der Möglichkeit, eine Lineardimension des Würfels in der "Transfermatrix-Methode" zu erhöhen (etwa bis $L_3=8$), ist eine Berechnung der Korrelationsfunktion für doch relativ große R sinnvoll, wenn man den zweidimensionalen Fall zu Rate zieht,

Eine genaue Rechnung ist in der Arbeit jedoch wegen des insgesamt schon sehr hohen Rechenzeitbedarfs nicht enthalten. Eine Anwendung der 3-d-Transfermatrix-Methode für gewisse Renormierungsgruppen-Rechnungen erscheint ebenfalls sinnvoll.

Figurenbeschreibung:

- Fig. 3.1 Spinglas-Ordnungsparameter $q(t)$ (linker Teil) und ψ^2 (rechter Teil) aufgetragen gegen Temperatur. Vergleich Monte-Carlo- mit exakten Resultaten für $N=16 \times 16$. Verschiedene Beobachtungszeiten werden gezeigt (Daten für $t=2000$ MCS/Spin und für ein 80×80 -Gitter /12/. Diese Punkte und die ausgefüllten Kreise haben Random-Startkonfigurationen zur Grundlage, während alle anderen vom Grundzustand gestartet wurden).
- Fig. 3.2 Spinglas-Ordnungsparameter $\{\langle \psi^2 \rangle\}_{av}$ gegen Temperatur aufgetragen für ein Mattis-Spinglas (durchgezeichnete Kurven) und ein Edwards-Anderson-Spinglas (gestrichelt) für verschiedene Lineardimensionen. Fehlerbalken wurden für Mittelungen über 100 Realisierungen $\{J_{ij}\}$ für $L=6$, 40 Realisierungen für $L=12$ und 25 für $L=16$ ermittelt.
- Fig. 3.3 Spinglas-Ordnungsparameter für das "Gauß-Modell" $\{\langle \psi^2 \rangle\}_{av}$ gegen die Temperatur aufgetragen für exakte Rechnungen (verschiedene $L \times L$) und Monte Carlo /11/. Fehlerbalken für 40 Realisierungen $\{J_{ij}\}$ für $L=6$, 8 und 20 für $L=12$.
- Fig. 3.4 Suszeptibilität χ_ψ für das " \pm J-Modell" gegen Temperatur für verschiedene L .
- Fig. 3.5 Suszeptibilität χ_ψ für das "Gauß-Modell" gegen Temperatur für verschiedene L .
- Fig. 3.6 Korrelationsfunktion $\langle S_O S_R \rangle^2 \equiv \{\langle S_i S_j \rangle_T^2\}_{av}$ gegen R in log-log-Darstellung (" \pm J-Modell").
- Fig. 3.7 Analog (Fig. 3.6) in semi-log-Darstellung (" \pm J-Modell").

- Fig. 3.8 Analog (Fig. 3.6) für "Gauß-Modell"
- Fig. 3.9 Analog (Fig. 3.7) für "Gauß-Modell"
- Fig. 3.10 Korrelationslänge ξ_{EA} gegen reziproke Temperatur aufgetragen für "+ J- und "Gauß-Modell". Vergleich mit Hochtemperatur- und 1-d-Mattis-Kurven.
- Fig. 3.11 Innere Energie des "+ J-Modells" gegen Temperatur für ein 10x10 Gitter. Gestrichelte Kurve von exakten Rechnungen, Punkte von MC-Rechnungen.
- Fig. 3.12 Grundzustandsenergie für "+ J"- und "Gauß"-Modell gegen inverse Lineardimension L aufgetragen.
- Fig. 3.13 Entropie "+ J-Modell" gegen Temperatur aufgetragen. Dreiecke sind MC-Resultate von Kirkpatrick /12/.
- Fig. 3.14 Typischer Monte-Carlo-Lauf ("J-Modell"). Gibt die Zeitabhängigkeit von $k_B T \chi$ und ψ_{11}^2 für ein 16x16-Gitter bei $k_B T/J = 1.0$ an. Die Abkühlzeit $t_c = 2000$ MCS ist weggelassen.
- Fig. 3.15 Spezifische Wärme/Spin gegen die Temperatur aufgetragen für eine spezielle Realisierung $\{J_{ij}\}$ des "+ J-Modells" und $N=16 \times 16$. Monte-Carlo-Resultate von Random-Start-Konfiguration (ausgefüllte Kreise) oder von Grundzustands-Startkonfiguration (offene Kreise). Kreuze bezeichnen MC-Resultate für $N=80 \times 80$ von Ref. /12/.
- Fig. 3.16 Innere Energie des "Gauß"-Modells gegen Temperatur aufgetragen für ein 16x16-Gitter. Monte-Carlo-Resultate für ein 65x65-Gitter sind von Ref. 9 und für das 50x50-System von Ref. 15.
- Fig. 3.17 Entropie aufgetragen gegen Temperatur für verschiedene L ("Gauß-Modell").

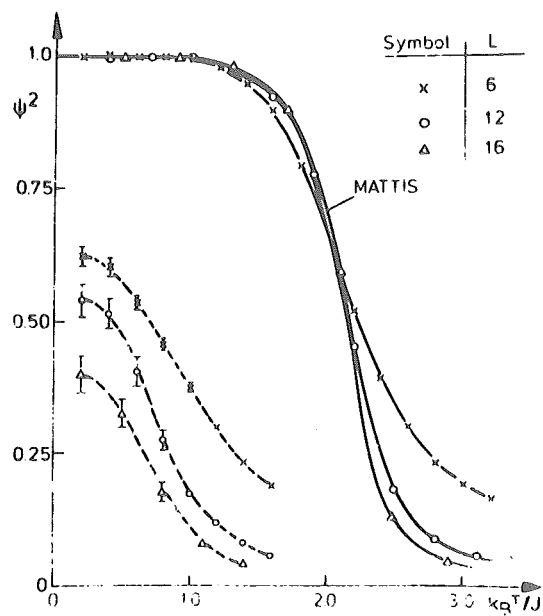
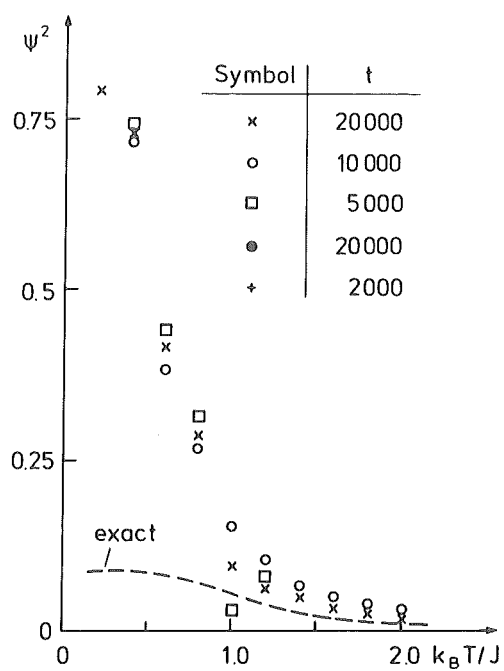
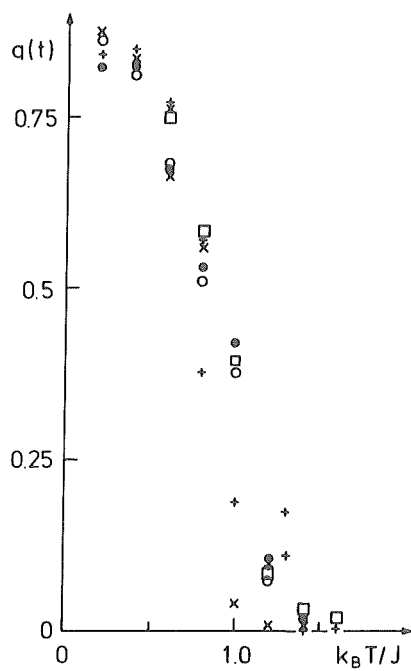


Fig. 3.1

Fig. 3.2



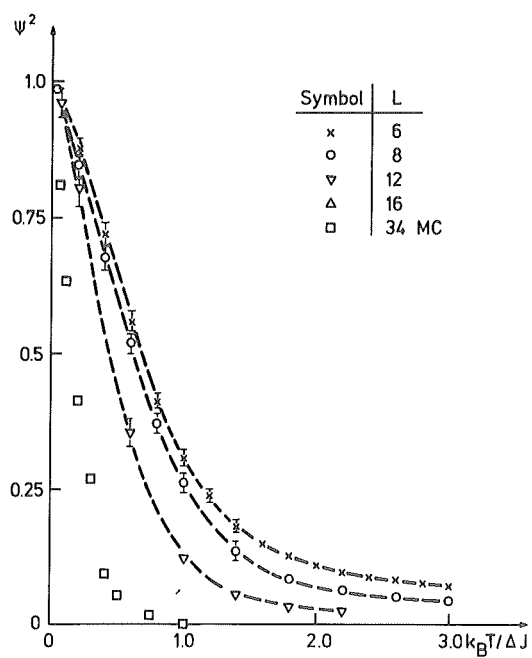


Fig. 3.3

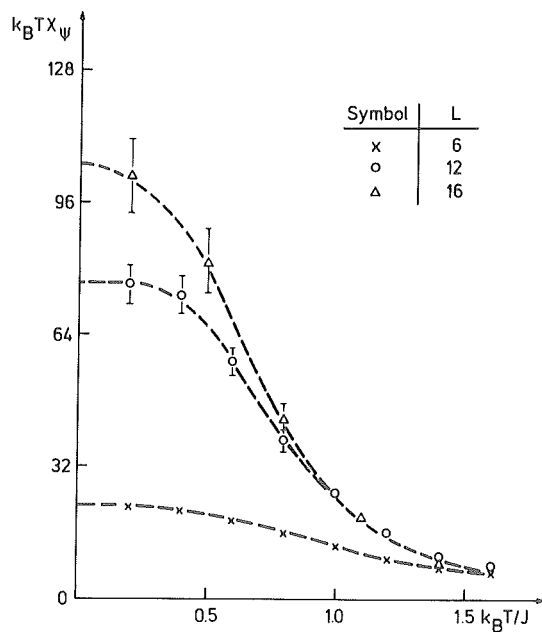


Fig. 3.4

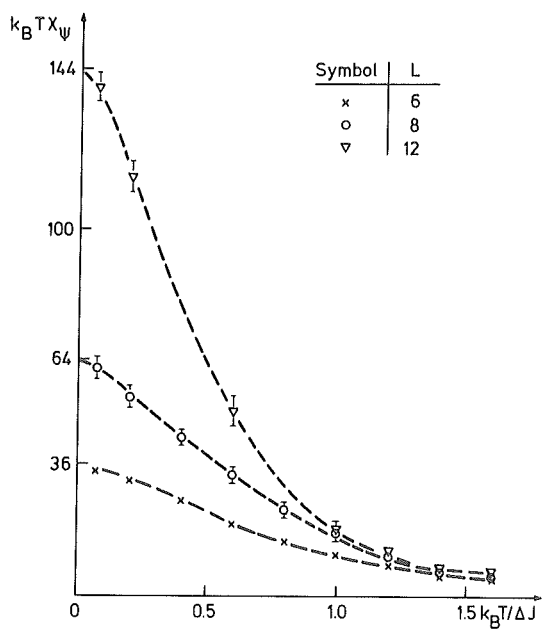


Fig. 3.5

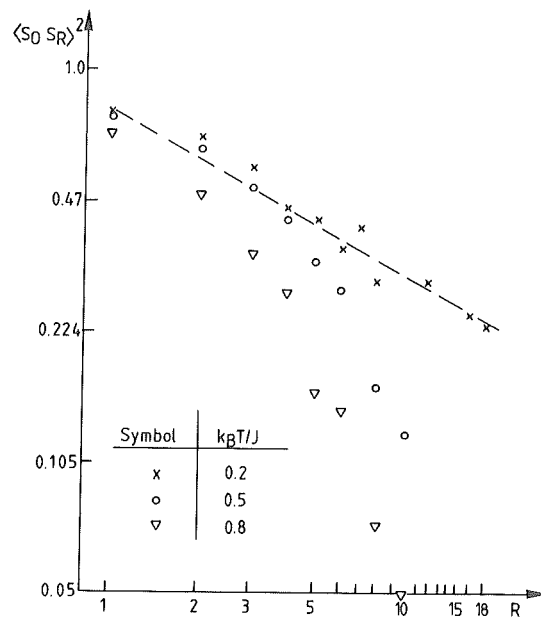


Fig. 3.6

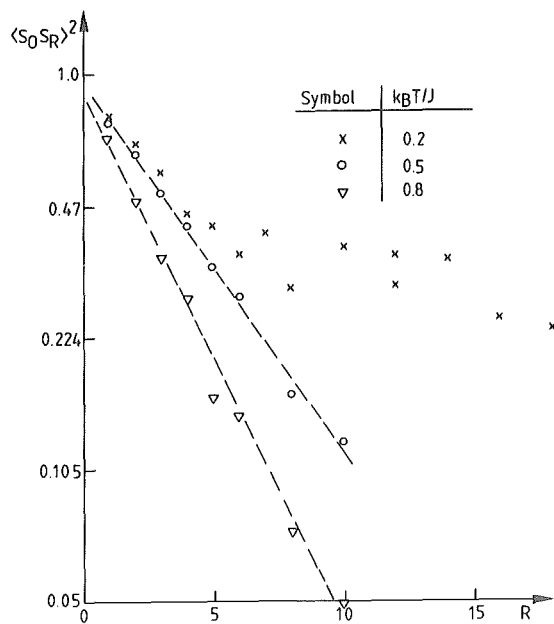


Fig. 3.7

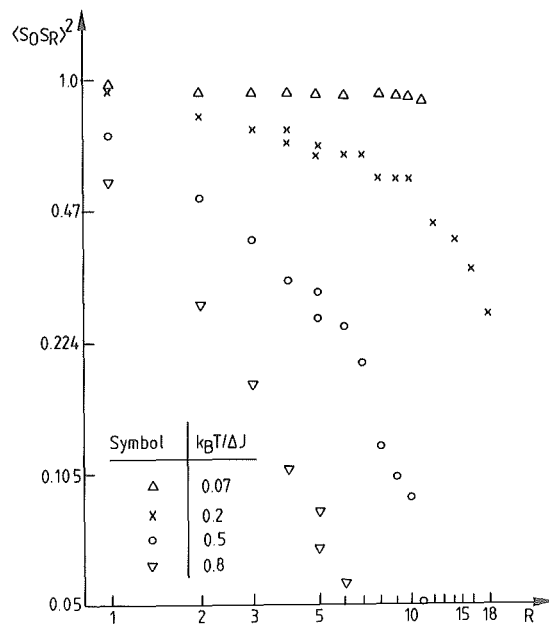


Fig. 3.8

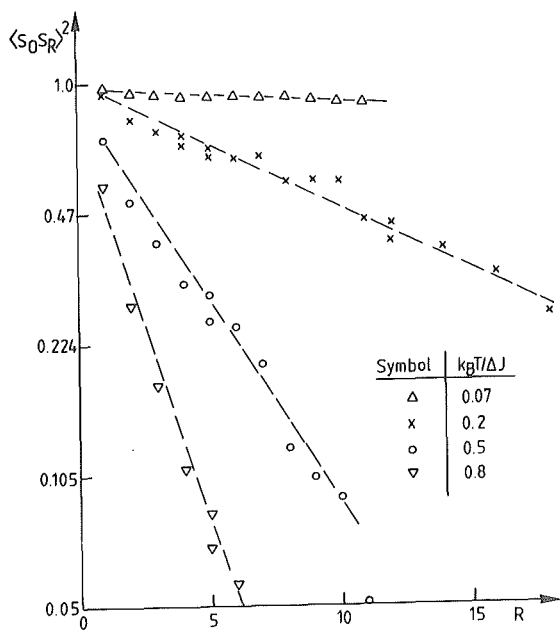


Fig. 3.9

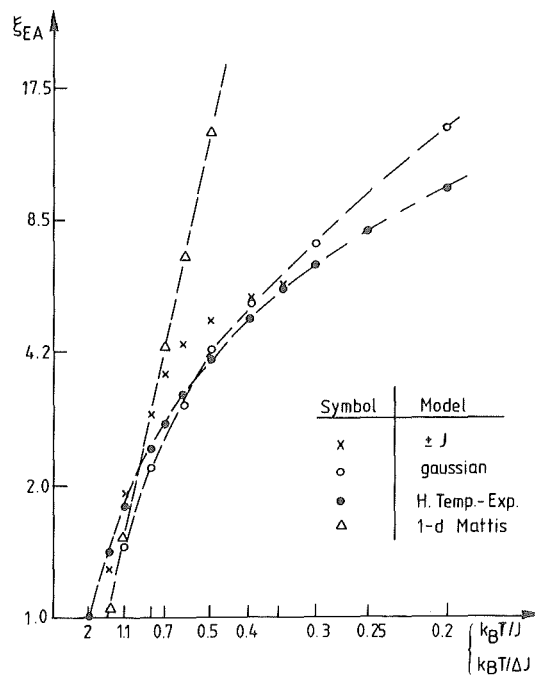


Fig. 3.10

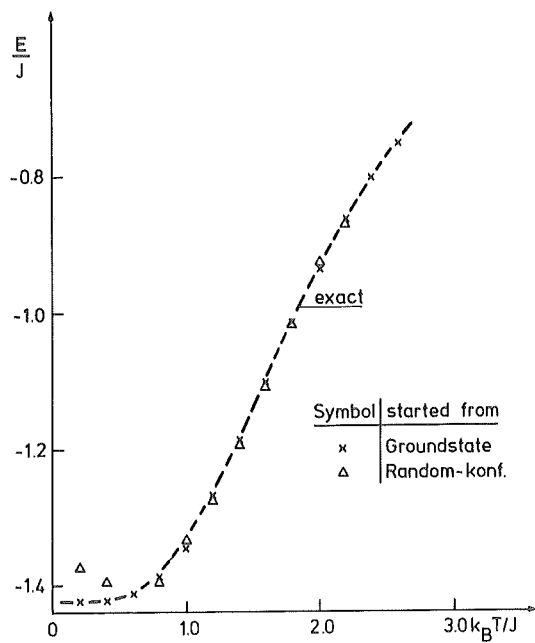


Fig. 3.11

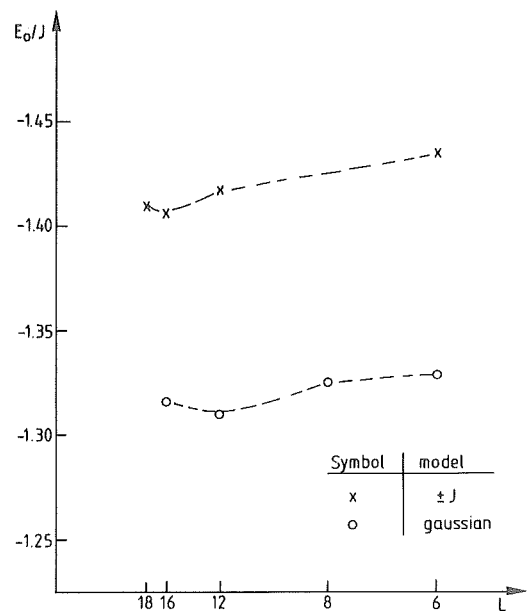


Fig. 3.12

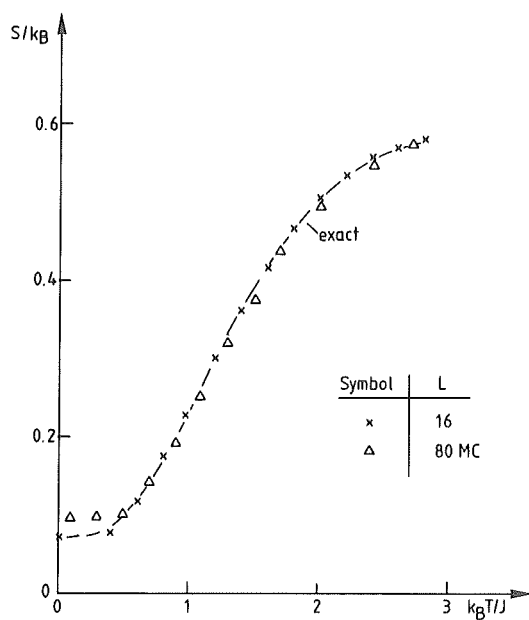


Fig. 3.13

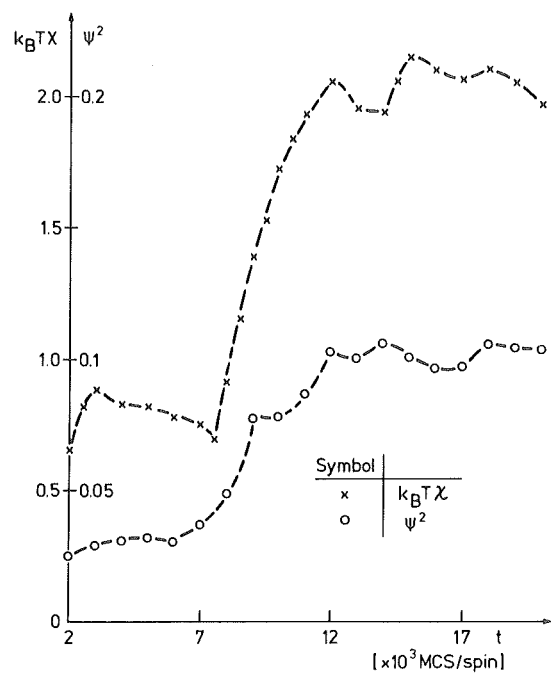


Fig. 3.14

- Fig. 3.18 Spezifische Wärme/Spin für "Gauß-Modell" gegen Temperatur aufgetragen für exakte Rechnungen bei verschiedenen L . Monte Carlo-Resultate für $L=34$ von Ref. 11 als Vergleich, ebenso " \pm J-Kurve".
- Fig. 3.19 Magnetisierung $\{M^2\}_{av}$ für das asymmetrische " \pm J-Modell" aufgetragen gegen Temperatur für verschiedene Konzentrationen x negativer Bonds und drei Systemgrößen $N=L \times L$. $L=6$, 50 Realisierungen (a), $L=8$, 40 Realisierungen (b), $L=12$, 25 Realisierungen (c). Bem.: wegen der beiden freien Ränder ist die Anzahl der Bindungen $2L^2-L$.
- Fig. 3.20 Magnetisierung $\{M^2\}_{av}$ gegen Konzentration frustrierter Plaketten (x_F) bei $k_B T/J = 0.2$ für verschiedene L . Pfeile markieren geschätzten Übergangspunkt für $N \rightarrow \infty$.
- Fig. 3.21 Phasen-Diagramm für das "asymmetrische \pm J-Modell". Fehlerbalken markiert die typische Unsicherheit bei der Feststellung der Phasengrenze.
- Fig. 3.22 Spezifische Wärme/Spin gegen Temperatur für verschiedene Konzentrationen x negativer Bonds und drei Systemgrößen. Anzahl der Realisierungen analog (Fig. 3.19)
 $L=6$, 50 Realisierungen (a)
 $L=8$, 40 " (b)
 $L=12$, 25 " (c)
Pfeile markieren die Position der Phasengrenze nach Fig. 3.21.
- Fig. 3.23 Log-log-Darstellung des Maximums der spezifischen Wärme gegen Lineardimension L für verschiedene Konzentrationen x . Kurven nur optisches Hilfsmittel.

Dreidimensionale Resultate

Fig. 3.24 Spezifische Wärme/Spin gegen Temperatur für "+ J-Modell" Monte Carlo-Resultate (MC) von Ref. /6/.

Fig. 3.25 Innere Energie gegen Temperatur ("J-Modell") Δ -Grundzustandsenergie in Monte-Carlo-Rechnungen von Ref. /12/.

Fig. 3.26 Ordnungsparameter ψ^2 gegen Temperatur. Alle exakten Resultate für 4x4x4 Gitter.

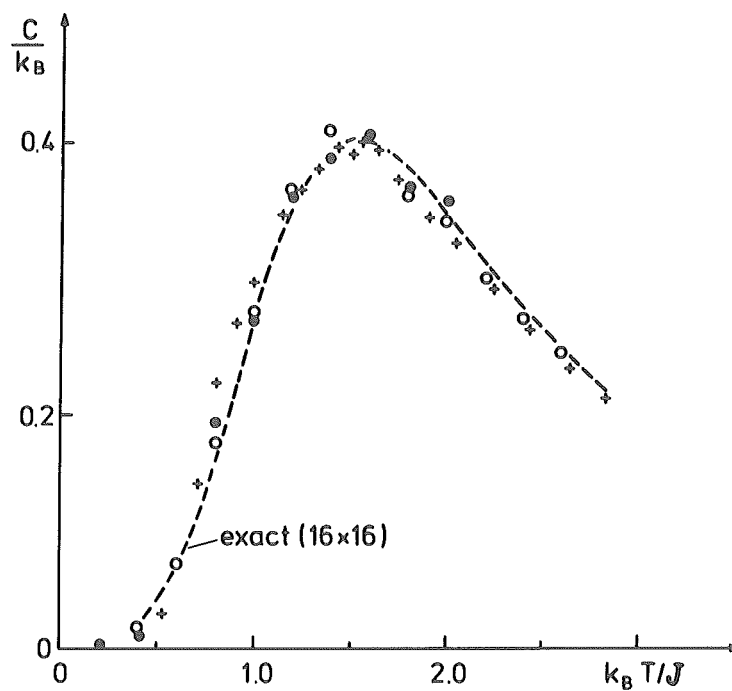


Fig. 3.15

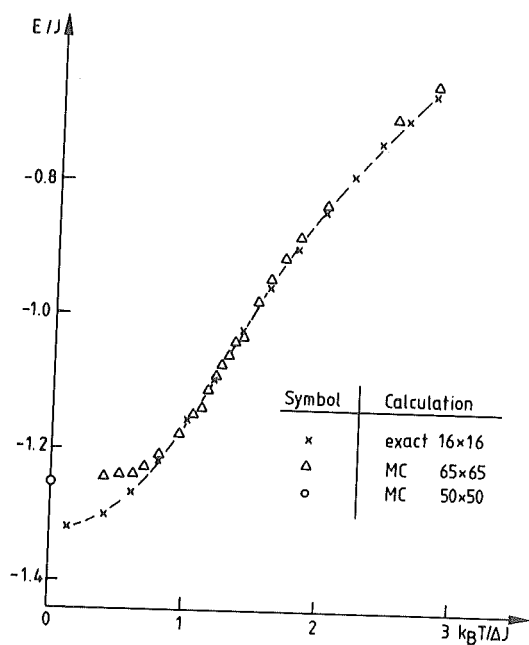


Fig. 3.16

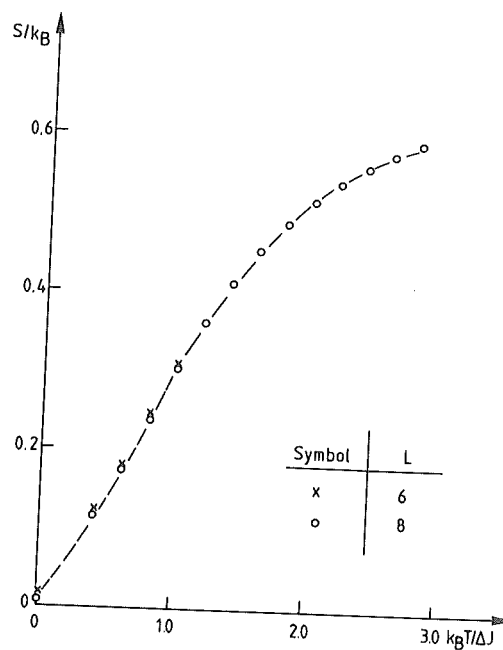


Fig. 3.17

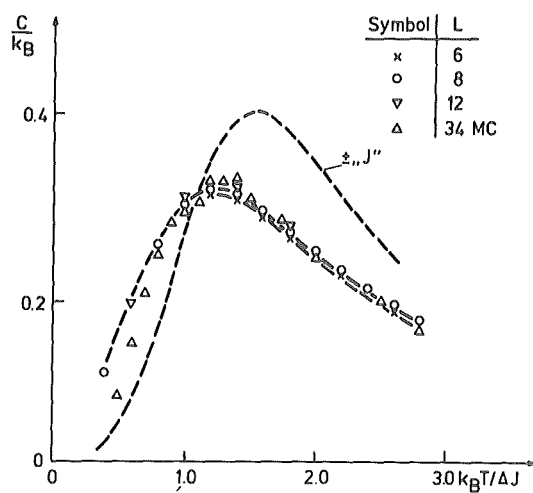


Fig. 2.18

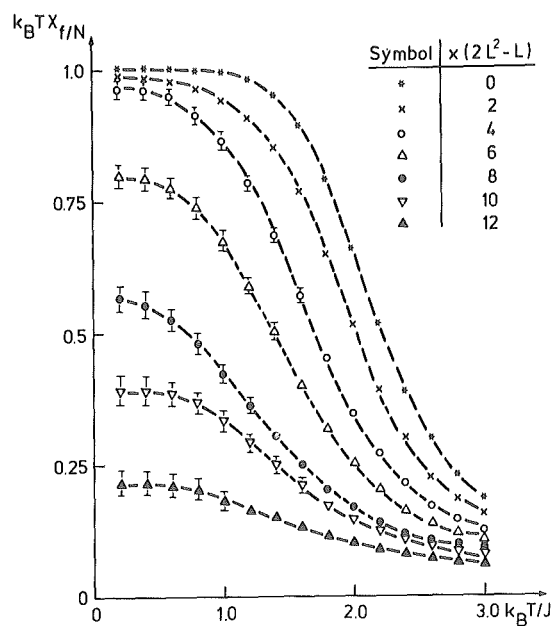


Fig. 2.19a)

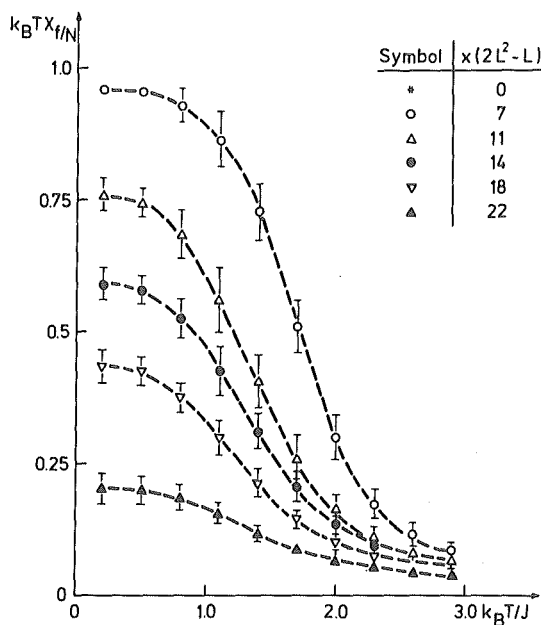


Fig. 2.19b)

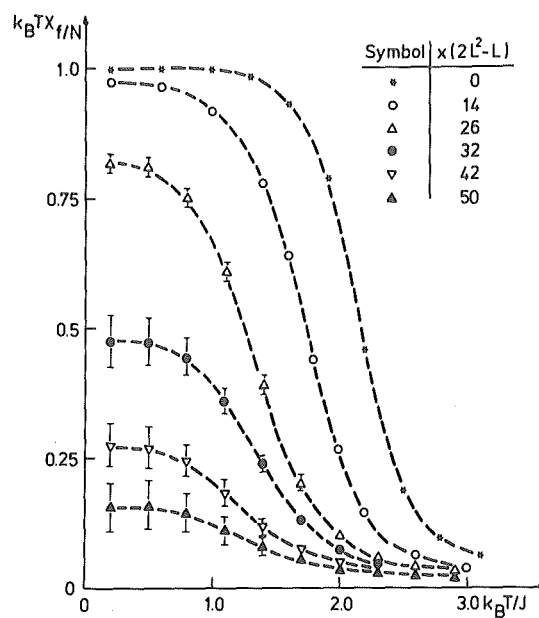


Fig. 2.19c)

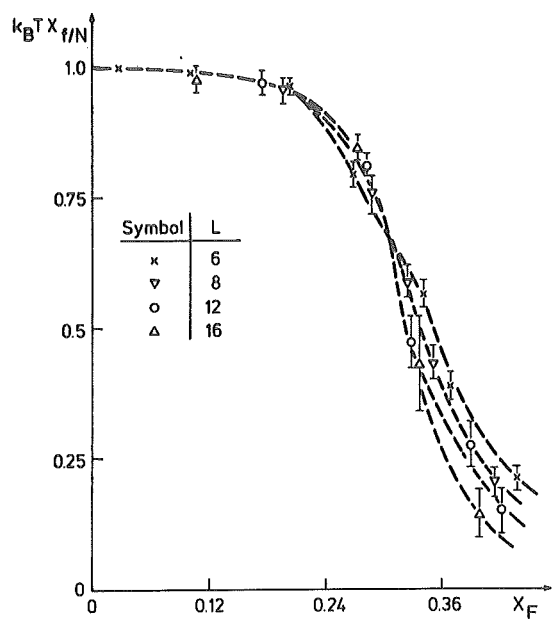


Fig. 3.20

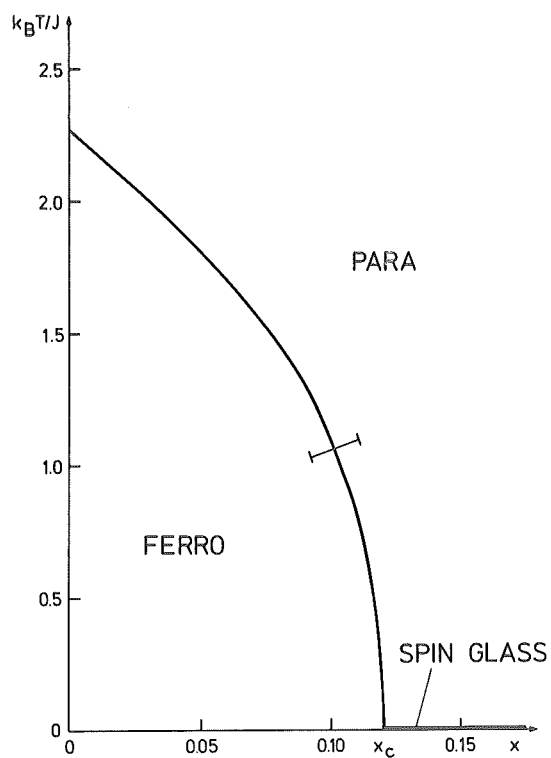


Fig. 3.21

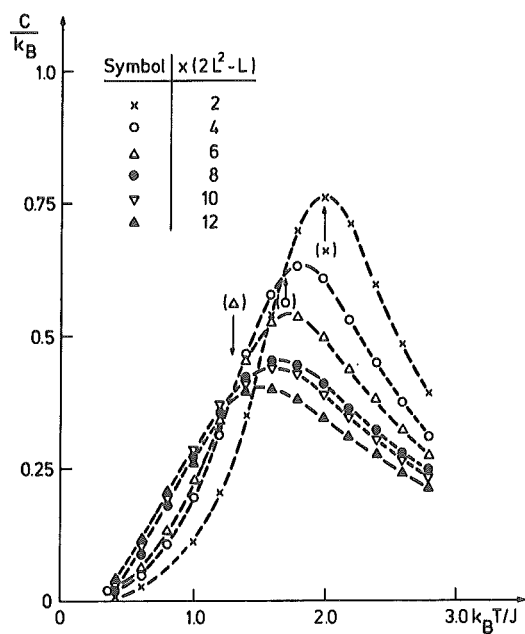


Fig. 3.22a)

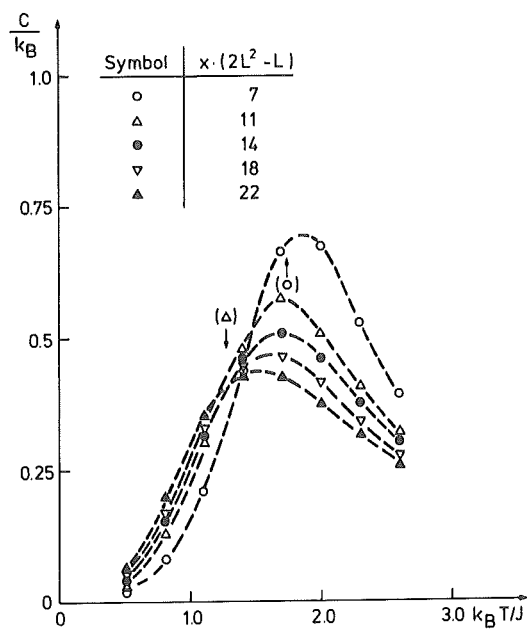


Fig. 3.22 b)

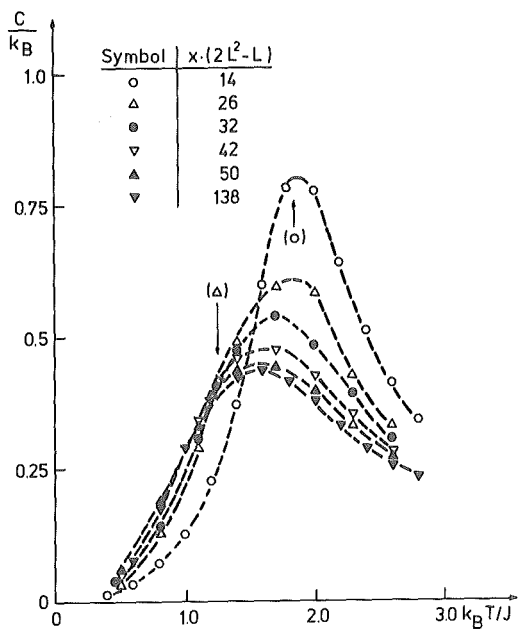


Fig. 3.22c)

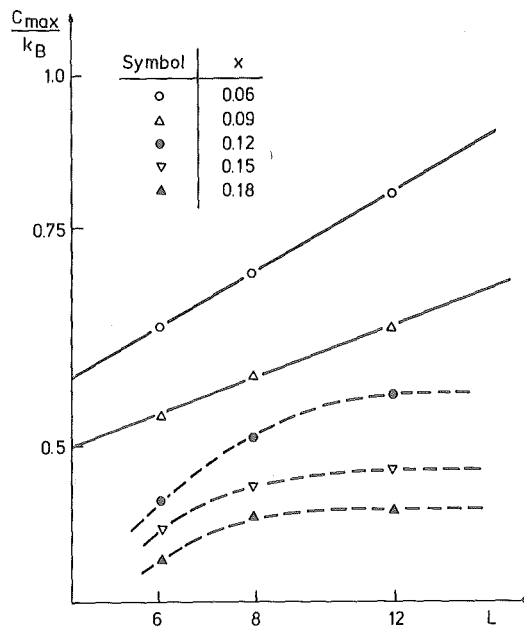


Fig. 3.23

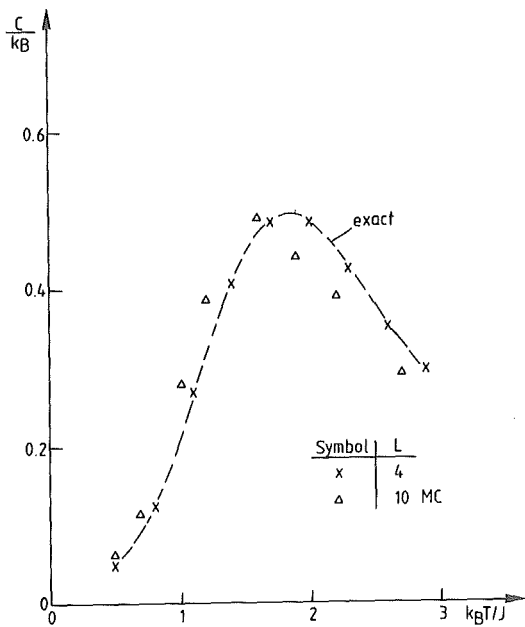


Fig. 3.24

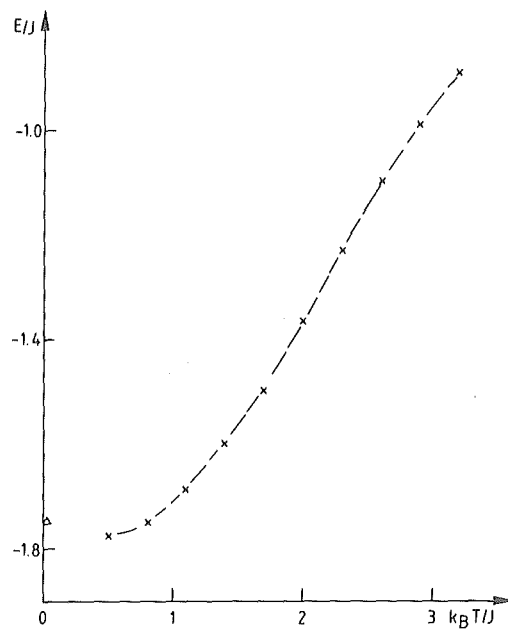


Fig. 3.25

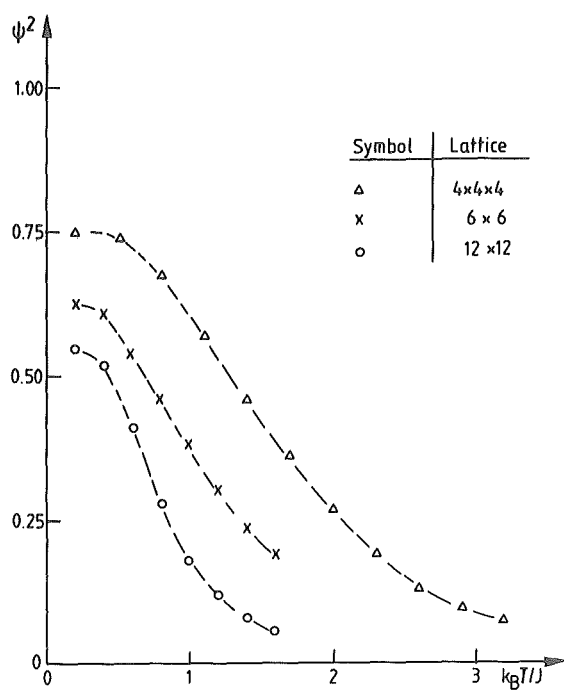


Fig. 3.26

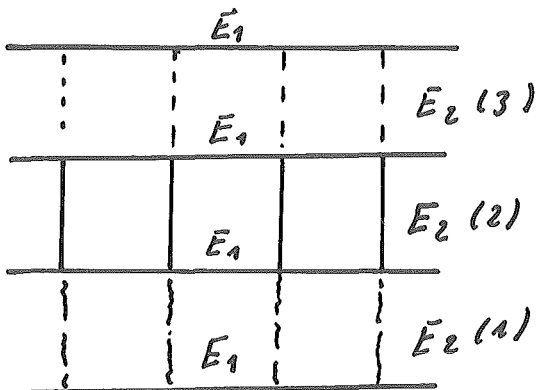
KAPITEL 4

Ising-Modell mit eingeschränkter Random-Verteilung

Während das "+ J- und Gauß-Modell" für Spingläser nur für relativ kleine Gitter mithilfe der "Transfermatrix-Methode" gelöst werden konnten, läßt sich für ein zweidimensionales Ising-Gitter mit "quasi reihenweiser" Random-Bond-Verteilung eine weitaus bessere Lösungsmöglichkeit angeben. Betrachten wir den Hamiltonian

$$\begin{aligned}
 -\beta \mathcal{H} = & E_1 \cdot \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L s_{ij} \cdot s_{i,j+1} + \\
 & + \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{j=1}^L E_2(i) \cdot s_{ij} \cdot s_{i+1,j} + \\
 & + H \sum_{j=1}^L s_{1j}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Dabei ist E_1 , d.h. die Kopplung in horizontaler Richtung, konstant, während die vertikale Kopplung $E_2(i)$ vom Index der Reihe i nicht aber von der Spalte j abhängt. Periodische Randbedingungen gelten nur horizontal. Außerdem läßt sich ein Magnetfeld H an die erste Reihe ankoppeln. Die Verteilung $P\{E_2(i)\}$ kann beliebig gewählt werden. Es zeigt sich, daß in diesem Modell keine Frustration möglich ist. Eine Verteilung



hängt. Periodische Randbedingungen gelten nur horizontal. Außerdem läßt sich ein Magnetfeld H an die erste Reihe ankoppeln. Die Verteilung $P\{E_2(i)\}$ kann beliebig gewählt werden. Es zeigt sich, daß in diesem Modell keine Frustration möglich ist. Eine Verteilung

$P\{E_2(i)\} = \frac{1}{2} \delta(E_2 - E) + \frac{1}{2} \delta(E_2 + E)$ entsprechend dem "+ J-Modell" führt zu einem speziellen Fall des Mattis-Spin-Glases. In den Rechnungen wurden eingehend eine Gaußverteilung sowie eine asymmetrische Delta-Verteilung für $E_2(i)$ betrachtet. Dabei muß darauf geachtet werden, daß der Wert Null keine endliche Wahrscheinlichkeit erhält, also z.B. aus der Gaußverteilung ausge-

klammert wird. Eine Kopplung $E_2(i)=0$ würde bedeuten, daß das Gitter an einer Stelle quer durchgeschnitten wird, also quasi eindimensionale Eigenschaften annähme. Das würde bedeuten, daß der angenommene Phasenübergang für das Modell nicht realisierbar wäre.

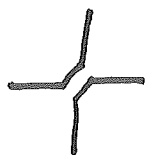
Die folgende Methode reduziert das Modell auf das Problem eines Random-Produkts für 2×2 Matrizen. Dieses läßt sich numerisch lösen, wobei eine genaue Abbildung der Random-Verteilung der 2×2 -Matrizen auf das Gitter möglich ist. Es lassen sich nur endliche Gitter betrachten, allerdings bis zu einer Größe von ungefähr 1600×1600 . Der Zeitaufwand ist hier im Vergleich zu der "Transfermatrix-Methode" weitaus geringer.

Das Problem der 2×2 -Random-Matrizen wurde eingehend in /71/ (I. Morgenstern und K. Binder, J. Chem. Phys. 69) behandelt, so daß hier die dort aufgeführte Methode ohne Beweise Anwendung findet.

Im folgenden wird die Berechnung der freien Energie mithilfe der "Dimer-Statistics-Methode" (vgl. /72/ McCoy und Wu, "The Two-Dimensional Ising Model", Harvard, 1973) auf das Problem des Random-Produkts von 2×2 -Matrizen reduziert. Die Herleitung folgt im wesentlichen folgendem Schema:

1. Die auf dem Ising-Gitter möglichen Spin-Konfigurationen werden isomorph auf geschlossene Polygonzüge eines ebenfalls zweidimensionalen Gitters abgebildet, das genau so viele Punkte enthält wie vorher das Ising-Gitter Spins. Die Ankopplung des Magnetfeldes an die 1. Reihe läßt sich ebenfalls berücksichtigen. McCoy und Wu beweisen exakt diese Abbildung. Die für die Zustandssumme notwendige Summation über alle möglichen Spin-Konfigurationen läßt sich nun dadurch ausführen, daß man alle möglichen geschlossenen Polygonzüge auf dem neuen Gitter zählt und gleichzeitig ihre statistischen Gewichte berücksichtigt. Um dieses Abzählen und Aufsummieren der statistischen Gewichte durchzuführen, folgt im nächsten Schritt.

2. Die Abbildung dieses neu entstandenen Gitters auf ein "Zählgitter", das es ermöglicht, verschiedenartige Polygonzüge genau zu unterscheiden. Als Beispiel sei die Überschneidung von Polygonzügen in einem Punkt erwähnt:



daneben ist auch die folgende Möglichkeit vorhanden.

Darauf wird später noch genau eingegangen. Jedenfalls ermöglicht es dieses neue "Zählgitter" wirklich, alle möglichen Polygonzüge genau abzuzählen und darüber hinaus die statistischen Gewichte mitzunehmen.

3. Das "Zählgitter" läßt sich nun wieder isomorph auf eine "Zählmatrix A" abbilden. Der "Pfaffian" dieser Zählmatrix A ($\text{Pf}(A)$) gibt nun genau die Summe der statistischen Gewichte aller möglichen Polygonzüge und damit aller möglichen Spin-Konfigurationen an. Für diesen "Pfaffian" gilt die wichtige Beziehung $(\text{Pf}(A))^2 = \det A$.

Das Problem reduziert sich also dahingehend, daß die Determinante der "Zählmatrix" zu berechnen ist. Dazu sind noch einige mathematische Tricks notwendig.

4. Zuerst wird die Matrix A soweit wie möglich diagonalisiert. Dies ist dadurch möglich, daß man A als Summe aus direkten Produkten von "fast zyklischen Matrizen" schreiben kann. Von "fast zyklischen Matrizen" sind die Eigenwerte bekannt. Wie unten ausführlich gezeigt, reduziert sich die $\det A$ zu einem Produkt

$$\det A = \prod_j \det B(j)$$

wobei die neuen Matrizen $B(j)$ aus der Zulegung in die Summe aus direkten Produkten hervorgehen.

5. Die Matrizen $B(j)$ lassen sich mithilfe zweier Hilfsmatrizen $T(j)$ und $B'(j)$ nach Reihen und Spalten entwickeln. Zum Schluß erhält man nach dieser Entwicklung ein Random-Produkt aus 2x2-Matrizen.

Bis zu diesem Punkt 5) ist die beschriebene Herleitung im wesentlichen eine Kombination zweier Methoden von McCoy und Wu /72/. Einmal für ein Random-Gitter ohne Boundary Magnetfeld und zum anderen für einen Ising-Ferromagneten mit Boundary-Magnetfeld. Durch die Kombination beider Methoden erhält man ein etwas verändertes 2x2-Random-Produkt, das aber mit der Methode aus /71/ noch immer berechnet werden kann.

6. In diesem letzten Schritt wird also das 2x2-Random-Produkt berechnet. Die hier angeführte Methode /71/ eignet sich weitaus besser für das gestellte Problem, als die von McCoy und Wu verwendete, die nur für eine ganz bestimmte Verteilung $P\{E_2(i)\} = n \cdot (\tanh^2(E_0))^{-n} \cdot (\tanh^2 E_2(i))^n$ für große n zu einer Integral-Gleichung führt, die nur schwer numerisch zu lösen ist. Eine Ankopplung des Boundary-Magnetfeldes ist bei McCoy und Wu darüber hinaus nicht möglich.

Zum Schluß sei noch einmal kurz das Schema der nun folgenden genaueren Herleitung erwähnt.

Spin-Konfigurationen →

- 1.) → geschlossene Polygonzüge →
- 2.) → "Zählgitter" →
- 3.) → Zählmatrix A →
- 4.) → Zerlegen von A →
- 5.) → $\det A$ führt zu 2x2-Random-Matrix-Produkt →
- 6.) → Berechnung des Random-Produkts

Im ersten Schritt beginnen wir mit der Zustandssumme, d.h. der Summation über alle möglichen Spin-Konfigurationen $\{S\}$, die dann auf die geschlossenen Polygonzüge abgebildet werden sollen. Dazu wird die Zustandssumme nach einem bekannten Rechenrick umgeschrieben.

Zustandssumme:

$$Z = \sum_{\{s\}} \left\{ \exp \left\{ E_1 \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L s_{ij} s_{j+1} \right\} \right\}.$$

$$\cdot \exp \left\{ \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{j=1}^L E_2(i) \cdot s_{ij} \cdot s_{i+1,j} \right\}.$$

$$\cdot \exp \left\{ H \cdot \sum_{j=1}^L s_{1j} \right\} \quad (4.2)$$

da:

$$\exp \{ E s s' \} = \begin{cases} \exp E \begin{cases} s=1, s'=1 \\ s=-1, s'=-1 \end{cases} \\ \exp (-E) \begin{cases} s=1, s'=-1 \\ s=-1, s'=1 \end{cases} \end{cases}$$

$$Z = (\cos \theta E_1)^N \cdot \prod_{i=1}^{L-1} (\cos \theta E_2(i))^L (\cos \theta H)^L$$

$$\cdot \sum_{\{s\}} \left\{ \prod_{i=1}^L \prod_{j=1}^L \{ 1 + z_1 s_{ij} \cdot s_{i+1,j} \} \right\}.$$

$$\cdot \left\{ \prod_{i=1}^{L-1} \prod_{j=1}^L \{ 1 + z_2(i) \cdot s_{ij} \cdot s_{i+1,j} \} \right\}.$$

$$\cdot \left\{ \prod_{j=1}^L \{ 1 + z s_{1j} \} \right\}$$

(4.3)

$$z_1 = t_1 \theta E_1, \quad z = t_2 \theta H$$

$$z_2(i) = t_3 \theta E_2(i), \quad N = L^2$$

Die Summation der S mit ungeradem Exponenten ergibt:

$$\sum_{\{s\}} s = \sum_{\{s\}} s^3 = 0$$

$$\sum_{\{s\}} 1 = 2^N$$

D.h. alle Produkte mit ungeradem Exponenten (s^{2n+1}) fallen bei der Summation über alle möglichen Konfigurationen heraus!

Alle s^{2n} (ger. Exponen) werden durch 1 ersetzt und die resultierende Funktion von $z_1, z_2(i)$ z mit 2^N multipliziert.

Nun wird die Summation über alle Konfigurationen $\{S = \pm 1\}$ ausgeführt:

$$Z = (2 \cosh E_1)^N \cdot \prod_{i=1}^{L-1} (\cosh E_2(i))^L \cdot (\cosh H)^L \cdot \sum_{r,p,q} z^r \cdot z_1^p \cdot \{z_2(i_1) \dots z_2(i_q)\} \cdot N(r,p,i_1 \dots i_q) \quad (4.4)$$

$N(r,p,i_1 \dots i_q)$ ist Anzahl der Figuren auf dem Gitter mit folgenden Eigenschaften.

1.) Jede Bindung zwischen Nachbarn ist mindestens einmal berücksichtigt.

2.) Die Figur enthält:

p horizontale Bindungen

q vertikale Bindungen an Orten $i_1 \dots i_q$

Sei $\ell_{i,j}$ - Zahl der Bindungen mit Punkt (i,j) als Endpunkt:

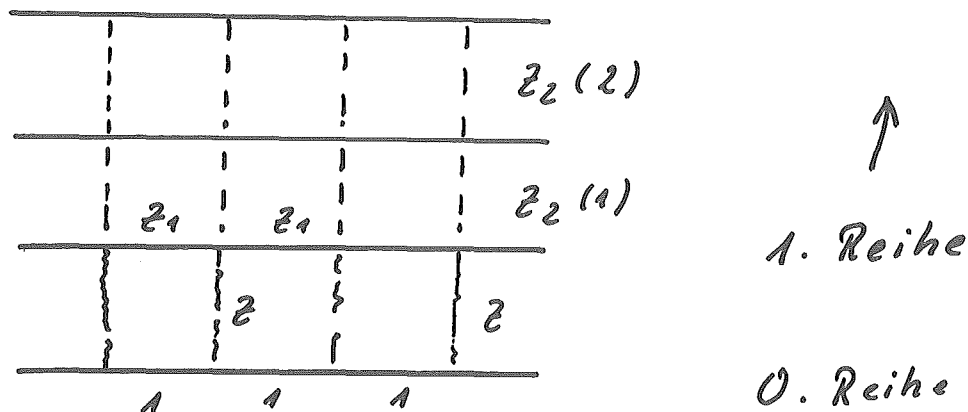
a) für $i > 1 \rightarrow \ell_{i,j}$ - geradzahlig $\{=0,2,4\}$

b) für $i=1$ (1. Reihe)

ℓ_{1j} - ungeradzahlig

r Anzahl der Punkte (auf 1. Reihe)
mit ℓ_{1j} ungeradzahlig

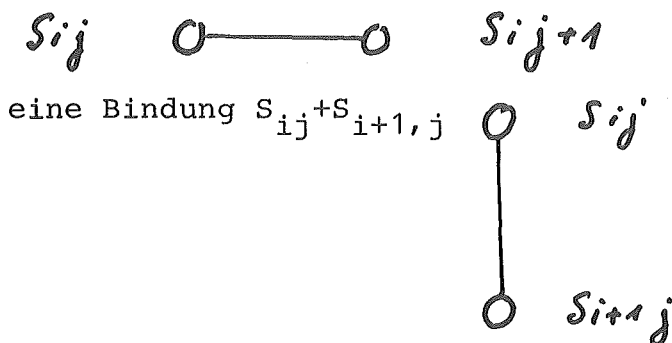
Die Berechnung der Zustandssumme reduziert sich damit auf das Abzählen und Wichten der Figuren auf dem Gitter mit den angegebenen Eigenschaften. Zuerst betrachten wir nur die Anzahl der Figuren $N(r, p, i_1 \dots i_q)$. Sie ist gleich der halben Anzahl der geschlossenen Polygonzüge auf dem gezeigten Gitter.



In der 0-ten Reihe wird das Magnetfeld angekoppelt. Die Bindung zur 1. Reihe erhält das Gewicht z , die horizontale Bindung hat das Gewicht 1.

Wie wir sehen werden, produziert die Abzählmethode für die $N(r, p, i_1 \dots i_q)$ auch gleichzeitig deren Gewichte $z^r \cdot z_1^p \cdot \{z_2(i_1) \dots z_2(i_q)\}$. Zuerst wenden wir uns dem Abzählen der Graphen zu.

Die Zustandssumme zerfällt in einen horizontalen und vertikalen Anteil mit Bindungen zwischen den Spins S_{ij} und S_{ij+1} bzw. S_{ij} und $S_{i+1,j}$. Eine Bindung $S_{ij} S_{ij+1}$ erhält den Graphen



Die Anbindung des Magnetfeldes S_{ij} führt zu einem einfachen O. Diese Bindungen sind die einzigen, die in der Zustandssumme auftreten.

Für die Zustandssumme gilt also:

$$Z \sim \sum_{\{s\}} \left\{ \prod_{ij} \left\{ 1 + z_1 \cdot s_{ij} \cdot s_{ij+1} \right\} \right\} \cdot$$

$$s_{ij} \quad \text{---} \quad s_{ij+1}$$

$$\cdot \left\{ \prod_{ij} \left\{ 1 + z_2(i) \cdot s_{ij} \cdot s_{i+1,j} \right\} \right\}$$

$$\cdot \left\{ \prod_j \left\{ 1 + z s_{1j} \right\} \right\}$$

$$\begin{array}{c} s_{ij} \\ | \\ s_{i+1,j} \end{array}$$

$$0 \quad s_{1j}$$

Da die s_{ij}^1 und s_{ij}^3 bei der Summation über alle Konfigurationen $\left\{ \begin{smallmatrix} \Sigma \\ \{ \sigma \} \end{smallmatrix} \right\}$ herausfallen, müssen nur s_{ij}^0 , s_{ij}^2 und s_{ij}^4 mitgezählt werden.

Das bedeutet auf dem Gitter,

daß nur folgende Graphen

mitgezählt werden müssen.

$$\bigcirc \quad s_{ij}^2$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \quad s_{ij}$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \bigcirc \\ | \\ \text{---} \end{array} \quad s_{ij}^4$$

Es werden also nur Punkte mitgezählt, bei denen eine gerade Anzahl Bindungen auftritt, das sind hier 0, 2 und 4. Die Graphen dürfen also keine freien Enden aufweisen, da sonst die Summation über zwei spiegelbildliche Konfigurationen jeweils Null

Man kann also wie hier zwei Punkte der 1. Reihe entweder "innen" oder "außen" herum verbinden. Es entstehen also zwei geschlossene Kurven, die der gleichen Spin-Konfiguration entsprechen. Im Falle von $r=0$, also kein freies Ende auf der 1. Reihe, gilt das gleiche.

$r = 0$, d.h. $i \geq 1$

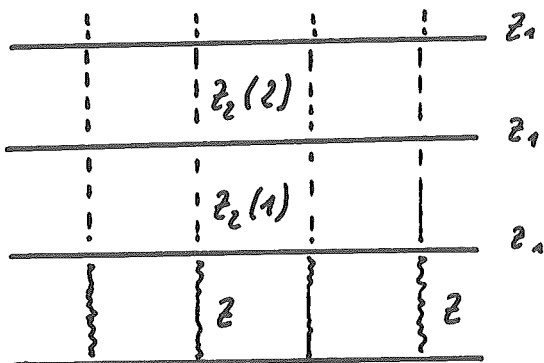


oder kein Loop auf der 0. Reihe

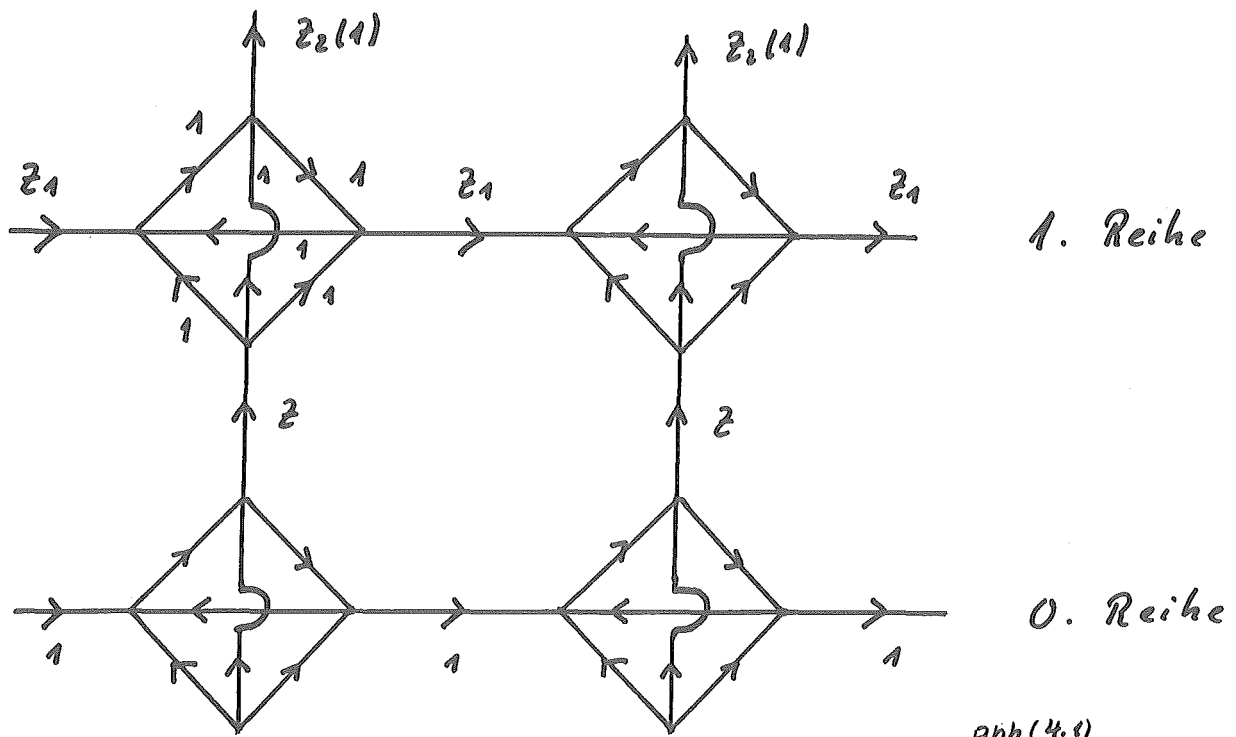
Zu einem beliebigen geschlossenen Polygonzug kann also ein Loop auf der 0. Reihe hinzugefügt oder auch weggelassen werden. Es entstehen also wieder zwei mögliche Graphen mit gleichem Gewicht, da wieder die Querverbindung auf der Reihe 0 mit 1 gezählt wird.

Es zeigt sich also, daß alle geschlossenen Kurven, die einen Beitrag zur Summation über alle Konfigurationen $\sum_{\{S\}}$ liefern, doppelt gezählt werden, da die Art der Verbindung auf der 0. Reihe keine Auswirkung auf die Spin-Konfiguration hat. Es bleibt also die Aufgabe, alle geschlossenen Kurven auf dem Gitter mit den richtigen Gewichten zu zählen.

Damit ist der Schritt 1.) beendet und es folgt 2.): die Abbildung des neuen Gitters auf ein "Zählgitter"



Dieses für die obige Herleitung verwendete Gitter wird nun also auf das folgende Zählgitter abgebildet. Den exakten mathematischen Beweis der Abbildung finden wir analog bei McCoy und Wu.



Soweit der zweite Schritt. Es folgt Schritt 3.):

Dieses Zählgitter läßt sich nun auf eine (antisymmetrische) Matrix A abbilden. Der "Pfaffian" dieser Matrix A ($\text{Pf}(A)$) zählt nun genau die geschlossenen Kurven mit ihren Gewichten. Für die Zustandssumme gilt damit

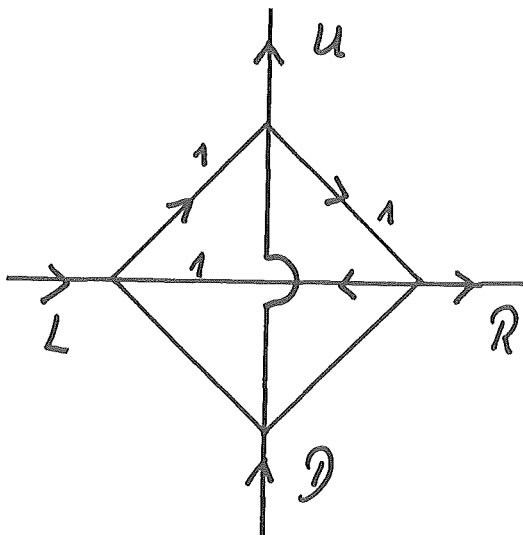
$$Z = \frac{1}{2} (2 \cosh E_1)^N \cdot \left(\prod_{i=1}^{L-1} \cosh E_2(i) \right)^L \cdot (\cosh H)^L \cdot \text{Pf}(A) \quad (4.5)$$

Es gilt weiter die wichtige Beziehung $(\text{Pf}(A))^2 = \det A$, die die folgenden Rechnungen erst sinnvoll erscheinen läßt.

Für die Aufstellung der (antisymmetrischen) Matrix A seien hier die notwendigen Regeln aufgeführt. Die Matrix A läßt sich nun vollständig in 4×4 -Unermatrizen zerlegen, die alle wiederum einem einheitlichen Aufbauschema folgen, das weiter unten erläutert wird. Die Punkte auf dem ursprünglichen Spin-Gitter, die mit (i,j) bezeichnet sind, kann man auch mit einem einfachen Index p bezeichnen, wobei $p = j + (i-1) \cdot L$ gilt. Mit dieser Relation werden die Indizes der Matrix A berechnet, mit denen

dann die im folgenden beschriebenen 4×4 Untermatrizen bezeichnet werden. Die folgende Schreibweise $A(i,j;i_1,j_1)$ bedeutet also $A(j+(i-1) \cdot L; j_1+(i_1-1) \cdot L)$ in der herkömmlichen Schreibweise. A ist also eine zweidimensionale Matrix, was aus der Schreibweise $A(i,j;i_1,j_1)$ nicht ersichtlich ist. Diese neue Schreibweise ist allerdings übersichtlicher, da sie sofort den Zusammenhang der 4×4 Untermatrix mit den entsprechenden Spins herstellt.

Betrachten wir einen Spin (i,j) . Dieser ist durch die in Schritt 1.)-2.) erläuterten Abbildungen isomorph im "Zählgitter" folgendermaßen dargestellt:



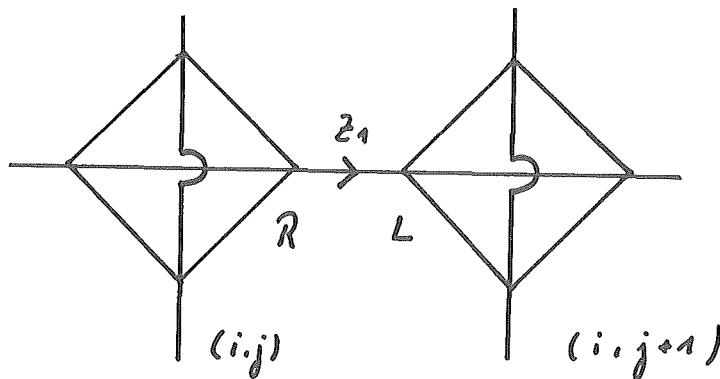
Für den Punkt (i,j) gilt die Einschränkung $0 \leq i \leq L$ und $1 \leq j \leq L$, da der Fall $j=1$ wegen der Ankopplung des Magnetfeldes gesondert betrachtet werden muß.

Die gezeigte Figur (Abb. 4.2) führt nun zu einer 4×4 Untermatrix, die sich am Ort $A(i,j;i,j)$ befindet. Die Buchstaben (R,L,U,D) bezeichnen die einzelnen Punkte im Zählgitter und tauchen als Indizes in der 4×4 -Untermatrix wieder auf. $A(i,j;i,j)$ sei zuerst einmal hingeschrieben:

$$A(i,j;i,j) = \begin{matrix} & \begin{matrix} R & L & U & D \end{matrix} \\ \begin{matrix} R \\ L \\ U \\ D \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Betrachten wir das Matrixelement (R,L) . Es steht für die Verbindung der mit R und L in (Abb. 4.2) bezeichneten Punkte. Vom Punkt R geht die Verbindung zu L in Richtung des Pfeiles, d.h. positives Vorzeichen. Das Gewicht dieser Verbindung ist nach (Abb. 4.1) 1, umgekehrt steht im Element (L,R) eine -1. Selbstterme sind 0 (kein Gewicht). Aus diesem Grunde und der bei den weiteren Untermatrizen auftretenden Analogie erhält man eine antisymmetrische Matrix A, wie schon mehrfach erwähnt.

Soweit die für den Spin (i,j) alleine auftretenden Terme. Der Spin (i,j) ist aber im Ising-Gitter mit seinem nächsten Nachbarn (etwa $(i,j+1)$) gekoppelt. Nach (Abb. 4.1) ist das der folgende Fall:



(Abb. 4.3)

Die nicht interessierenden Pfeile und Gewichte sind weglassen. Es existiert nur eine Verbindung R nach L mit einem Gewicht z_1 (horizontale Bindung). Für die Untermatrix gilt also:

$$A(i,j;i,j+1) = \begin{matrix} & \begin{matrix} R & L & u & D \end{matrix} \\ \begin{matrix} R \\ L \\ u \\ D \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & z_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

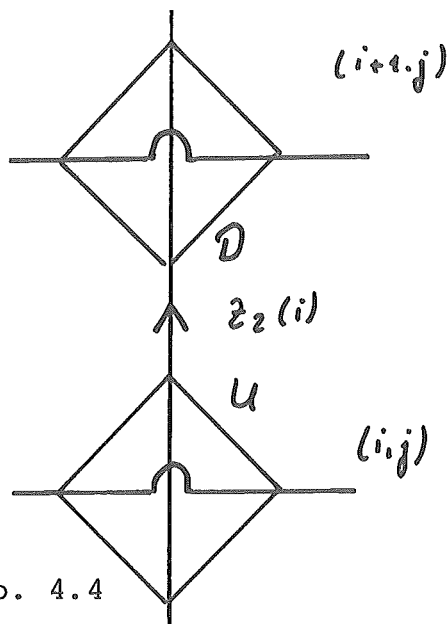
wieder mit der Einschränkung $1 \leq i \leq L$ und $1 \leq j \leq L-1$ wegen der ersten Reihe.

Die Bindung $(i,j+1) \rightarrow (i,j)$ gehört zum Element $A(i,j+1;i,j)$. Es existiert analog zu oben nur die Bindung $L \rightarrow R$ allerdings mit negativem Vorzeichen. Für die transponierten Untermatrizen gilt also

$$A^T(i,j+1;i,j) = -A(i,j;i,j+1)$$

Damit erhält man wieder die erwähnte Antisymmetrie.

Analog verfährt man bei den vertikalen Bindungen, bei denen man



allerdings die Random-Verteilung berücksichtigen muß, die zu einem $z_2(i)$ im Element (U,D) führt.

Analog zu oben gilt:

$$1 \leq i \leq L-1$$

$$1 \leq j \leq L$$

Abb. 4.4

Die Antisymmetrie gilt wieder analog, d.h.

$$A(i,j;i+1,j) = -A^T(i+1,j;i,j) =$$

$$= \begin{matrix} & R & L & U & D \\ \begin{matrix} R \\ L \\ U \\ D \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_2(i) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

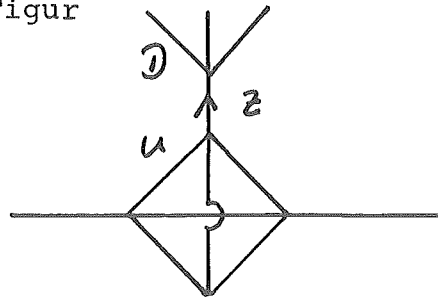
Dies gilt für eine Bindung $(i,j) \rightarrow (i+1,j)$ und damit für alle anderen analog. Wie schon oben erwähnt, erfordert die 1. Reihe wegen des angekoppelten Magnetfeldes eine gesonderte Betrachtung

tung. Die Überlegungen gelten allerdings analog. Hinzu kommt, daß auf dem Polygonzug-Gitter zusätzlich eine 0. Reihe wegen des Magnetfeldes hinzukommt. Man erhält also zusätzlich die folgenden Matrixelemente

$$A(0,j; 1,j) = -A^T(1,j; 0,j) =$$

$$= \begin{matrix} & \begin{matrix} R & L & U & D \end{matrix} \\ \begin{matrix} R \\ L \\ U \\ D \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

für die Anbindung der 0. Reihe an die erste Reihe. Am Zählgitter hat man folgende Figur

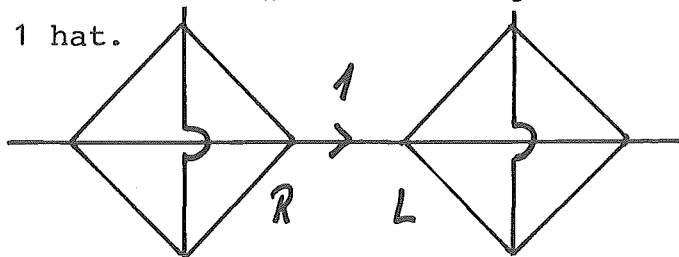


(Abb. 4.5)

Das Gewicht Z vom Magnetfeld herrührend steht nun im Element (U,D) .

Die 4×4 Matrizen $A(1,j; 1,j)$ sind von diesen Betrachtungen nicht betroffen und analog zu den von (Abb. 4.2) berechneten zu bestimmen.

Es bleibt noch die Querverbindung in der 0. Reihe, die das Gewicht 1 hat.



(Abb. 4.6)

Abb. 4.6 führt zu folgendem Resultat

$$A(0,j; 0,j+1) = -A^T(0,j+1; 0,j) =$$

$$= \begin{matrix} & \begin{matrix} R & L & U & D \end{matrix} \\ \begin{matrix} R \\ L \\ U \\ D \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Soweit die für die Aufstellung der Matrix A notwendigen Regeln. Den exakten mathematischen Beweis für die Abbildung des "Zählgitters" auf die "Zählmatrix" A entnehmen wir analog McCoy und Wu /72/. Wie oben schon angeführt, gilt die wichtige Beziehung $(\text{Pf}(A))^2 = \det A$. Daraus ergibt sich für die Zustandssumme:

$$Z^2 = \frac{1}{4} \left\{ 2 \cosh E_1 \right\}^{2N} \cdot \left\{ \prod_{i=1}^{L-1} \cosh E_2(i) \right\}^{2L} \cdot \left\{ \cosh H \right\}^{2L} \cdot \det A$$

Es bleibt also die Berechnung von $\det A$. Dazu wird A so weit wie möglich diagonalisiert. A wird in ein direktes Produkt aus den folgenden Hilfsmatrizen zerlegt. Es handelt sich um relativ einfach gebaute Matrizen, die zumindest "fast zyklisch" sind, d.h. man kennt deren Eigenwerte.

$$I_{L+1} = \left[\begin{array}{cccc} 1 & & & \\ & 1 & & 0 \\ & & \ddots & \\ & 0 & & 1 \end{array} \right] \Bigg\}^{L+1}$$

I_{L+1} ist also die $(L+1) \times (L+1)$ Einheitsmatrix. Die nachfolgende Matrix Z_{L+1} ist genauso aufgebaut, wegen der Magnetfeldankopplung an die erste Reihe befindet sich, wie weiter unten erklärt wird, im Element (1.1) der Wert $1/Z_1$.

$$Z_{L+1} = \left[\begin{array}{cccc} 1/z_1 & & & \\ & 1 & & 0 \\ & & \ddots & \\ & 0 & & 1 \end{array} \right] \Bigg\}^{L+1}$$

H_{L+1} ist ebenfalls eine $(L+1) \times (L+1)$ -Matrix

$$H_{L+1} = \left[\begin{array}{cccc} 0 & 1 & & \\ & 0 & 1 & \\ & & \ddots & \\ & 0 & & 1 \\ -1 & & & 0 \end{array} \right] \Bigg\}^{L+1}$$

Zuerst betrachten wir die 4×4 -Matrizen

$$A(i,j;i,j) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Sie stehen in der Diagonale und hängen weder von i und j .

D.h. es genügt, sie mit der entsprechend dimensionierten Einheitsmatrix direkt zu multiplizieren. Schreibweise $\otimes I_{L+1}$
 $\otimes I_L$.

Die Elemente $A(i,j;i,j+1)$ befinden sich in der Nebendiagonale. Diese Position erreichen sie durch die direkte Multiplikation mit der Matrix H_{L+1} , die nur 1en in der Nebendiagonale enthält. Die entsprechende Dimensionalität wird durch die direkte Multiplikation mit der Einheitsmatrix erreicht. Z_L enthält darüber hinaus an der Stelle $(1,1)$ das Element $\frac{1}{z_1}$, das dazu dient, in der ersten Reihe den Faktor 1 statt z_1 hervorzurufen.

Für die Matrix A ergibt sich folgende Darstellung:

$$A = A(i,j;i,j) \otimes \bar{I}_{L+1} \otimes \bar{I}_L + \quad (4.5)$$

$$+ A(i,j;i,j+1) \otimes H_{L+1} \otimes Z_L +$$

$$+ A(i,j+1;i,j) \otimes H_{L+1}^T \otimes Z_L +$$

$$+ \begin{bmatrix} \boxed{A(0,j,1,j)} & & & \\ & \boxed{A(1,j,2,j)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \boxed{A(i,j,i+1,j)} \\ & 0 & & & \end{bmatrix} \otimes H_{L+1}$$

$$+ \begin{bmatrix} \boxed{A(1,j,0,j)} & & & \\ & \boxed{A(2,j,1,j)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \boxed{A(i+1,j,i,j)} \\ & & & & \end{bmatrix} \otimes H_{L+1}^T$$

Die angegebene Darstellung von A wird im wesentlichen von noch näher zu erläuternden Symmetrieeigenschaften ab.

So hängt die (4×4) Untermatrix $A(i,j;i,j)$ weder von i noch von j ab. Die in der Diagonale stehenden 4×4 -Matrizen sind also alle identisch. Dadurch ist die Darstellung $A(i,j;i,j)$

$\times I_{L+1} \times I_L$, also die direkte Multiplikation mit entsprechend dimensionierten Einheitsmatrizen, wie oben in der ersten Zeile, möglich.

Die 4×4 Matrizen $A(i,j;i,j+1)$ hängen für $i \geq 1$ wieder nicht von i und j ab, stehen aber im wesentlichen in der Nebendiagonale. Diese Position erreichen sie durch die direkte Multiplikation mit der Matrix H_{L+1} , die genau da das Element 1 enthält, wo eine 4×4 Matrix analog plazierte wird. Die richtige Dimension wird durch die weitere direkte Multiplikation mit Z_L erreicht. Z_L enthält wie oben erwähnt noch an der Stelle $(1,1)$ den Wert $1/Z_1$, der dazu dient, in der ersten Reihe den Faktor 1 statt Z_1 hervorzurufen, der in der 4×4 -Matrix $A(0,j,0,j+1)$ steht. Der entsprechende Ausdruck steht in der zweiten Zeile von Gl. (4.5). Die dritte Zeile enthält den entsprechenden antisymmetrischen Ausdruck. Damit fehlt nur noch die Behandlung der vertikalen Bindung, deren Stärke von der Reihe i im Gitter abhängt. Damit hängen auch die 4×4 -Matrizen $A(i,j;i+1,j)$, wie oben schon zu sehen, von i ab, allerdings nicht von j . Die in der vierten Zeile von Gl. (4.5) stehende $(L \times L)$ -Matrix mit den 4×4 -Matrizen $A(i,j;i+1,j)$ in der Diagonale direkt multipliziert mit H_{L+1} plazierte die 4×4 -Matrizen $A(i,j;i+1,j)$ wieder an den vierten Platz in der Matrix A. Analog geht man in der fünften Zeile für den antisymmetrischen Fall vor. Hier konnte also nur die Unabhängigkeit der Matrixelemente von j ausgenutzt werden.

Wichtig ist nun, daß die "fast zyklischen" Matrizen H_{L+1} und H_{L+1}^T diagonalisiert werden können. Es gilt:

$$U H_{L+1} U^{-1} = \begin{bmatrix} e^{i\pi/L} & & & 0 \\ & e^{3i\pi/L} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{(2L-1)i/L} \end{bmatrix}$$

und für den transponierten Fall:

$$U H_{L+1}^T U^{-1} = \begin{bmatrix} e^{-i\pi/L} & & & \\ & e^{-3i\pi/L} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{-(2L-1)i/L} \end{bmatrix}$$

Diese diagonalisierten Matrizen werden in Gl. (4.5) in Zeile zwei und drei eingesetzt. Damit ist der vierte Schritt des Schemas ausgeführt, d.h. die Matrix A in Summen aus inneren Produkten zerlegt.

Im fünften Schritt wird nun die Determinante dieser Summe berechnet.

Nach der Ausführung der Summation zerfällt die Determinante in folgendes Produkt:

$$\det A = \prod_j \det B(j)$$

$$\vartheta = \pi (2n-1) / L$$

$$n = 1, 2, \dots, L$$

Der Ausdruck für ϑ rührt von den Eigenwerten von H_{L+1} her. $B(\vartheta)$ ist eine $4(L+1) \times 4(L+1)$ -Matrix, die aus der Summation in Gl. (4.5) nach Anwendung der diagonalisierten Matrizen H_{L+1} und H_{L+1}^T in Zeile zwei und drei her. Für $B(\vartheta)$ gilt:

$$B_{j,j}(\vartheta) = \begin{matrix} & \mathcal{R} & \mathcal{L} & \mathcal{U} & \mathcal{D} \\ \begin{matrix} \mathcal{R} \\ \mathcal{L} \\ \mathcal{U} \\ \mathcal{D} \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1+z_1 e^{i\vartheta} & -1 & -1 \\ -1-z_1 e^{-i\vartheta} & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$B_{0,0}(\vartheta) = \begin{matrix} & \mathcal{R} & \mathcal{L} & \mathcal{U} & \mathcal{D} \\ \begin{matrix} \mathcal{R} \\ \mathcal{L} \\ \mathcal{U} \\ \mathcal{D} \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1+e^{i\vartheta} & -1 & -1 \\ -1-e^{-i\vartheta} & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Def:

$$T_{j,j}(\vartheta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ (1+z_1 e^{i\vartheta})^{-1} & (1+z_1 e^{-i\vartheta})^{-1} & 1 & 0 \\ -(1+z_1 e^{i\vartheta})^{-1} & (1+z_1 e^{-i\vartheta})^{-1} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Analog fehlt z_1 in $T_{0,0}(\)$.

alle anderen Matrixelemente sind wieder Null.

Wie man leicht sieht, ist $\det T(\vartheta) = 1$. Nach der Multiplikation mit $B(\vartheta)$ erhält man eine neue Matrix $B'(\vartheta) = T(\vartheta) B(\vartheta)$ mit folgendem Aussehen:

$$B'_{j,j}(\vartheta) = \begin{bmatrix} 0 & 1 + z_1 e^{i\vartheta} & -1 & 1 \\ -1 - z_1 e^{-i\vartheta} & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -ia & -b \\ 0 & 0 & b & ia \end{bmatrix}$$

für $1 \leq j \leq L$

$$B'_{0,0}(\vartheta) = \begin{bmatrix} 0 & 1 + e^{i\vartheta} & -1 & 1 \\ -1 + e^{-i\vartheta} & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -ic & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ic \end{bmatrix}$$

mit

$$a = -2 z_1 \sin \vartheta |1 + z_1 e^{i\vartheta}|^{-2}$$

$$b = (1 - z_1^2) |1 + z_1 e^{i\vartheta}|^{-2}$$

$$c = -2 \sin \vartheta |1 + e^{i\vartheta}|^{-2}$$

(4.6)

alle anderen Matrixelemente sind wieder Null.

$B'(\vartheta)$ lässt sich nach Zeilen 1 und 2 (usw) entwickeln, da alle weiteren Elemente in diesen beiden Zeilen 0 sind.

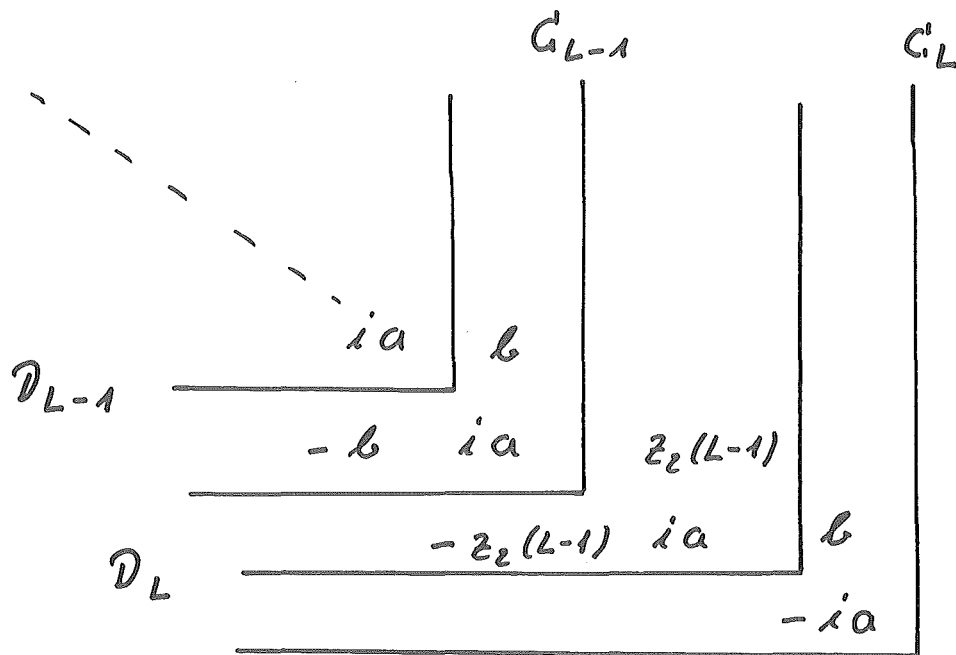
$$\det B(\vartheta) = |1 + e^{i\vartheta}|^2 \cdot |1 + z_1 e^{i\vartheta}|^{2N} \cdot \det C'(\vartheta)$$

wobei $C(\vartheta) =$

$$\begin{bmatrix} i\epsilon & 0 & & & & \\ 0 & -i\epsilon & \epsilon & & & \\ & -\epsilon & ia & b & & \\ & & -b & -ia & z_2(1) & \\ & & -z_2(1) & ia & b & \\ & & & -b & -ia & z_2(2) \\ & & & & z_2(2) & ia \dots \end{bmatrix}$$

$C(\vartheta)$ ist eine $2(L+1) \times 2(L+1)$ -Matrix, deren Determinante als Produkt aus 2×2 -Matrizen darstellbar ist.

Wir schreiben nur $\det C(\vartheta) \equiv C_L$; C_L ist die Determinante der $2 \cdot (L+1) \times 2 \cdot (L+1)$ -Matrix. Mit D_L bezeichnen wir die Determinante der $(2 \cdot L+1) \times (2 \cdot L+1)$ -Matrix, bei der die letzte Zeile und Spalte weggelassen sind. Analog gehen wir bei C_{L-1} und D_{L-1} vor. Mit der eben erläuterten Schreibweise bezeichnen wird die im folgenden Schema erläuterten Determinanten.



Die eingezeichneten Geraden bezeichnen jeweils die rechte und untere Grenze der entsprechenden Determinanten. C_L und D_L lassen sich nun nach den entsprechenden Unterdeterminanten C_{L-1} und D_{L-1} entwickeln. Es gilt

$$C_L = (a^2 + b^2) \cdot C'_{L-1} + a z_2^2(L-1) \cdot D_{L-1}$$

und

$$D_L = a C'_{L-1} + z_2^2(L-1) D_{L-1} \quad (4.7a)$$

Diese Verfahrensweise gilt nun nicht nur für die rechte untere Ecke der Matrix, sondern allgemein für ein $2 < n \leq L$.

Aus der Gl. (4.7a) lassen sich damit Rekursionsgleichung für C_L und D_L ableiten. In Vektorschreibweise erhält man also

$$\begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & a z_2^2(n-1) \\ a & z_2^2(n-1) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C'_{n-1} \\ D_{n-1} \end{pmatrix} \quad (4.7b)$$

wobei $\lambda(n-1) = z_2^2(n-1)$

Für die Anfangsbedingung gilt nach analoger Herleitung:

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & a z^2 \\ a & z^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_0 \\ D_0 \end{pmatrix}$$

(4.8)

mit $C_0 = c^2$ $D_0 = -c$

In dieser Herleitung ist auf die Abhängigkeit von nicht näher eingegangen. In Zukunft schreiben wir

$$G_L(\vartheta) \equiv \det C'(\vartheta)$$

Die freie Energie $F = -\frac{1}{N} \ln Z$ läßt sich danach folgendermaßen schreiben

$$\begin{aligned} F = & - \frac{1}{2} \ln(2 \cosh E_1) + \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L-1} \ln \cosh E_2(i) + \\ & + \frac{1}{L} \ln \cosh H - \ln 4 / 2N + \\ & + \frac{1}{2N} \sum_{\vartheta} \ln |1 + e^{i\vartheta}|^2 + \\ & + \frac{1}{L} \sum_{\vartheta} \ln |1 + z_1 e^{i\vartheta}|^2 + \\ & + \frac{1}{2L} \sum_{\vartheta} \frac{1}{L} \ln G_L(\vartheta) \} \end{aligned}$$

(4.9)

Boundary-Magnetisierung und -Suszeptibilität ergeben:

$$M_b = \chi_L H + \frac{1}{L} \sum_{\nu} \frac{\partial}{\partial H} \left\{ \frac{1}{L} \ln C_L(\nu) \right\} \quad (4.10)$$

$$\chi_b = 1 - \chi_L^2 H + \frac{1}{L} \sum_{\nu} \frac{\partial^2}{\partial H^2} \left\{ \frac{1}{L} \ln C_L(\nu) \right\} \quad (4.11)$$

Der Ausdruck $\ln C_L(\nu)$ und dessen Ableitungen lassen sich nun numerisch mit der nachfolgend noch zu beschreibenden "Matrix-Methode" berechnen.

Für die Berechnung von $\frac{1}{L} \ln C_L$ ($C_L \equiv C_L(\nu)$) werden in /7/ im wesentlichen zwei Methoden entwickelt:

a) Bellman-Methode

Diese Methode gilt nur für einen eingeschränkten Parameterbereich. Bei allgemeineren Verteilungen $P\{E_2(i)\}$ können Schwierigkeiten auftreten. Deshalb wurde diese Methode nicht verwendet, sondern die

b) Matrix-Methode

Diese Methode beruht auf der numerischen Multiplikation der 2x2-Matrizen. Gegenüber a) hat sie den Nachteil, nur für eine spezielle Konfiguration zu gelten. (a) berechnet $\frac{1}{L} \ln C_L > \ln C_{av}$). Physikalisch läßt sich mit dieser Methode die freie Energie für ein ganz bestimmtes (endliches) Gitter mit einer Verteilung $P\{E_2(i)\}$ berechnen, während a) die freie Energie für alle Anordnungen $P\{E_2(i)\}$ mittelt.

Bei genügend großen Gittern wird der Unterschied zwischen a) und b) allerdings bei den in (3) verwendeten Verteilungen minimal.

Die Matrizen T_i seien nun entsprechend der Verteilung $P\{E_2(i)\}$ angeordnet

$$M_K = T_{K-1} \cdots T_2 \cdot T_1, \quad T_i = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & a \lambda(i) \\ a & \lambda(i) \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Die Matrix M_K enthält Zahlen von einer Größenordnung, die vom Computer nicht mehr bewältigt wird. Man definiert sich nun eine Matrix \tilde{T}_K folgendermaßen:

$$T_K \equiv d_K \tilde{T}_K$$

$$d_K = \frac{1}{4} \left| m_{11}^{(K)} + m_{12}^{(K)} + m_{21}^{(K)} + m_{22}^{(K)} \right|$$

Dabei sind $m_{ij}^{(k)}$ die Elemente von M_K . Man erhält nach der Multiplikation für die Matrix M_{L-1} bzw. \tilde{M}_{L-1} :

$$M_{L-1} = d_{L-1} \cdots d_1 \cdot \tilde{M}_{L-1}$$

wobei

$$\tilde{M}_{L-1} = \tilde{T}_{L-1} \cdots \tilde{T}_2 \cdot \tilde{T}_1 = \begin{pmatrix} \tilde{m}_{11} & \tilde{m}_{12} \\ \tilde{m}_{21} & \tilde{m}_{22} \end{pmatrix}$$

In Vektorschreibweise heißt das:

$$\begin{pmatrix} G_L \\ D_L \end{pmatrix} = M_{L-1} \begin{pmatrix} G_1 \\ D_1 \end{pmatrix} =$$

$$= d_{L-1} \cdots d_1 \begin{pmatrix} \tilde{m}_{11} & \tilde{m}_{12} \\ \tilde{m}_{21} & \tilde{m}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & a z^2 \\ a & z^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_0 \\ D_0 \end{pmatrix}$$

Für die zu berechnende Größe $\frac{1}{L} \ln C_L$ gilt also:

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \ln C_L &= \ln \left\{ d_{L-1}^{1/L} \dots d_1^{1/L} \right\} + \\ &+ \frac{1}{L} \ln \left\{ \tilde{m}_{11} \left\{ (a^2 + b^2) C_0 + a z^2 D_0 \right\} + \right. \\ &\left. + \tilde{m}_{12} \left\{ a C_0 + z^2 D_0 \right\} \right\} \end{aligned} \quad (4.13)$$

In dieser Formulierung bringt die schrittweise Multiplikation keine Schwierigkeiten mit sich. Die Zahlen $d_k^{1/L}$ bzw. \tilde{m}_{ij} sind von Größenordnung 1.

Die Ableitungen lassen sich analog errechnen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H} \left\{ \frac{1}{L} \ln C_L \right\} &= \\ &= \frac{1}{L} \left\{ 2 a \frac{1}{L} H (1 - \frac{1}{L} H) D_0 \tilde{m}_{11} + \right. \\ &\quad \left. + 2 \frac{1}{L} H (1 - \frac{1}{L} H) D_0 \tilde{m}_{12} \right\} / \\ &\quad / \left\{ \tilde{m}_{11} \left\{ (a^2 + b^2) C_0 + a z^2 D_0 \right\} + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{m}_{12} \left\{ a C_0 + z^2 D_0 \right\} \right\} \end{aligned} \quad (4.14)$$

\tilde{m}_{ij} , d_h , C_0 , D_0 sind unabhängig von H .

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial H^2} \left\{ \frac{1}{L} \ln C_L \right\} &= \\ &= \frac{1}{L} \cdot \left\{ \left\{ -2x \, \text{tgr}^3 H + 2x \, \text{tgr} H \right\}^2 + \right. \\ &\quad \left. + (2x - 8x \, \text{tgr}^2 H + 6 \, \text{tgr}^4) \right\} / \\ &\quad / \left\{ y + x \, \text{tgr}^2 H \right\}^2 \end{aligned}$$

$$x = (a \cdot \tilde{m}_{11} + \tilde{m}_{12}) D_0$$

$$y = \left\{ (a^2 + b^2) \tilde{m}_{11} + a \tilde{m}_{12} \right\} G_0$$

(4.15)

Spezifische Wärme:

Eine ähnlich einfache Form der Ableitung wie bei M_b und χ_b ist nicht möglich, da die einzelnen T_i von der Temperatur abhängig sind. C_M wurde deshalb durch numerisches Ableiten von $\frac{1}{L} \ln C_L$ berechnet (Approximation mit einem Polynom 4. Grades).

$$C'/k_B = - \frac{1}{k_B T} \frac{\partial^2}{\partial (k_B T)^2} F$$

$$\begin{aligned}
 \frac{C}{k_B} = & - \frac{1}{k_B T} \left\{ \left\{ (1 - \tanh^2 E_1) \cdot E_1' + \right. \right. \\
 & + \left. \tanh E_1 \cdot E_1'' \right\} + \\
 & + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{L-1} \left\{ (1 - \tanh^2 E_2(i)) E_2'(i) + \right. \\
 & + \left. \tanh E_2(i) \cdot E_2''(i) \right\} + \\
 & + \frac{1}{N} \left\{ (1 - \tanh^2 H) \cdot H' + \tanh H \cdot H'' \right\} \\
 & + \frac{1}{2N} \sum_{\mathcal{V}} \left\{ \left\{ (1 + 2z_1 \cos \mathcal{V} + z_1^2) \cdot \right. \right. \\
 & \cdot (2z_1'' \cos \mathcal{V} + 2z_1 \cdot z_1'' + 2z_1'^2) - \\
 & - (2z_1' \cos \mathcal{V} + 2z_1 z_1')^2 \left. \right\} / \\
 & / \left\{ 1 + 2z_1 \cos \mathcal{V} + z_1^2 \right\}^2 \left. \right\} + \\
 & + \frac{1}{2N} \sum_{\mathcal{V}} \frac{\partial^2}{\partial (k_B T)^2} \left\{ \frac{1}{L} \ln C_L \right\} \quad (4.16)
 \end{aligned}$$

wobei: $E_1 = \frac{1}{2} E_1$

$$E_1' = (1 - \frac{1}{2} E_1^2) E_1'$$

$$E_1'' = - 2 \frac{1}{2} E_1 (1 - \frac{1}{2} E_1^2) E_1' + (1 - \frac{1}{2} E_1^2) E_1''$$

Für die Ableitungen der Kopplungen bzw. Magnetfelder gelten

$$E_1 = \tilde{E}_1 / \mu_0 T$$

$$E_1' = \frac{\partial E_1}{\partial (\mu_0 T)}$$

$$E_1'' = \frac{\partial^2 E_1}{\partial (\mu_0 T)^2}$$

$$E_2(i) = R(i) \cdot E_1 \quad \text{Ableitungen analog}$$

$$H = \frac{\tilde{H}}{k_B \cdot T} \quad \text{Ableitungen analog}$$

$R(i)$ enthält die Random-Verteilung.

Wie die Herleitungen für die freie Energie und deren Ableitungen zeigen, reduziert sich das Problem auf die Berechnung der Matrixelemente \tilde{m}_{ij} , also der Matrix, die nach der Multiplikation der Random-Matrizen entsteht. Mit der Kenntnis der \tilde{m}_{ij} und der herausgezogenen Konstanten d_k lassen sich auch alle weiteren interessierenden Ableitungen entweder direkt wie im Falle des Magnetfeldes oder numerisch wie im Falle der spezifischen Wärme berechnen.

Das numerische Programm berechnet also nur die \tilde{m}_{ij} bzw. d_k sowie deren Ableitung nach der Temperatur. Alle Größen lassen sich dann durch Einsetzen in die obigen Formeln berechnen.

Berechnung von T_c :

In dem Random-Matrix-Produkt (4.7) gehorcht die Variable

$x_n = \frac{C_n(j)}{D_n(j)}$ nach Fürstenberg /71/ mit Wahrscheinlichkeit 1 für $n \rightarrow \infty$ einer stationären Verteilung. Im Grenzfall $j=0$, d.h. bei Systemgröße $L \rightarrow \infty$ wird die Matrix T_i diagonal (4.12)

$$T_i(j=0) = \begin{pmatrix} b^2(0) & 0 \\ 0 & \lambda(i) \end{pmatrix}$$

da $a(j=0) = 0$ vergleiche (4.6)

Die einzig mögliche stationäre Verteilung für x_n in diesem Fall ist entweder parallel zur C- oder D-Achse. Im ersten Fall gilt:

$$\lim_{j \rightarrow 0} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln C_L = \ln b^2(0) \quad (4.17)$$

im zweiten Fall wegen der Random-Verteilung

$$\lim_{j \rightarrow 0} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln D_L = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L-1} \ln \lambda(i) \quad (4.18)$$

Die freie Energie hängt nun vom größeren der beiden Werte ab. Ein "Cross-over" ist zu erwarten, wenn beide Werte übereinstimmen, und sich danach die Größenrelation umdreht, d.h. man muß (4.17) und (4.18) gleichsetzen

$$\ln b^2(0) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L-1} \ln \lambda(i)$$

bzw. nach (4.6) und (4.7)

$$\ln \left(\frac{1 - z_1}{1 + z_1} \right)^2 = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L-1} \ln z_2^2(i) \quad (4.19)$$

Für den ferromagnetischen Ising-Fall, d.h. für die Verteilung $P\{E_2(i)\} = \delta(E_2(i) - E_1)$ ergibt sich folgende Lösung:

$\frac{1-z_1}{1+z_1} = z_2$, die die bekannte Relation für $T=T_c$ im ferromagnetischen Onsager-Gitter darstellt. Die Relation (4.19) wurde iterativ auf dem Computer berechnet.

Dabei wurde die rechte Seite von (4.19) durch ein Integral über eine spezielle Verteilung $P'\{\tilde{E}_2\}$ ersetzt:

$$\text{mit } z_1 = \tanh \tilde{E}_1 / k_B T$$

$$\text{und } z_2(i) = \tanh \tilde{E}_2(i) / k_B T$$

ergibt sich für die kritische Temperatur folgende implizite Gleichung

$$\ln \left\{ \frac{1 - \tanh \tilde{E}_1 / k_B T_c}{1 + \tanh \tilde{E}_1 / k_B T_c} \right\} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{E}_2 P'\{\tilde{E}_2\} \ln \tanh^2 \tilde{E}_2 / k_B T_c$$

(4.20)

Für $P'\{\tilde{E}_2\}$ wurde die für das endliche Gitter im Computer generierte Verteilung herangezogen. Der Random-Generator liefert für die vertikalen Kopplungen $E_2(i)$ $L-1$ Werte, die einer Gaußverteilung oder allgemeiner einer Verteilung $P\{E_2(i)\}$ gehorchen, falls man den Grenzübergang $L \rightarrow \infty$ macht. Die für die endlichen Gitter verwendeten $L-1$ Werte $E_2(i)$ gehorchen deshalb nur einer Summe aus Delta-Verteilungen, die mit dem vorher erwähnten $P'\{E_2\}$ bezeichnet wurde.

$$P'(E_2) = \frac{1}{L-1} E_2(1) + \dots + \frac{1}{L-1} E_2(L-1) \quad (4.21)$$

Diese Verteilung wurde nun in das Integral in (4.20) eingesetzt. Die implizite Gleichung (4.20) für T_c wurde wie schon erwähnt iterativ gelöst. Eine physikalische Erklärung dieser Herleitung für T_c ist schwer möglich. Sie wird eigentlich nur durch das Resultat für das Onsager-Gitter und den Vergleich mit den numerischen Rechnungen verifiziert.

Numerische Resultate

1.) Wahl der Random-Konfiguration

Für die vorliegenden Kurven wurde im ersten Teil für $P\{E_2(i)\}$ eine Gaußverteilung gewählt.

Mit $E_2(i) = R(i) \cdot E_1$ gilt für die Verteilung von $R(i)$

$$P\{R(i)\} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp \left\{ - (R(i) - \bar{R})^2 / 2 \Delta R \right\} \quad (4.22)$$

mit $\bar{R}=0$ und $\Delta R=1$.

Die Werte von $R(i)$ wurden vom Computer generiert. Wegen der doch geringen Anzahl der Random-Werte wurde analog zu den Spin-Gläsern die Einhaltung folgender Mittelwerte überprüft:

$$\langle R(i) \rangle_{av} = 0$$

$$\langle R(i)^2 \rangle_{av} = 1$$

$$\langle R(i)^4 \rangle_{av} = 3$$

Falls die überprüfte Random-Konfiguration eine Abweichung von mehr als 3% von diesen Werten zeigte, wurde sie verworfen und eine neue generiert und der Vorgang wiederholt.

Im zweiten Teil werden Resultate für eine Doppel-Peak-Delta-Verteilung

$$\mathcal{P}\{E_2(i)\} = \frac{1}{2} \delta(E_2(i) - E_1) + \frac{1}{2} \delta(E_2(i) - \frac{1}{2} E_1) \quad (4.23)$$

gezeigt.

Die Resultate können möglicherweise dazu dienen, zur Überprüfung des Replica-Tricks /2/

$$\langle \ln 2 \rangle_{av} = \lim_{n \rightarrow 0} \left\langle \frac{2^n - 1}{n} \right\rangle_{av}$$

herangezogen zu werden.

1. Teil: Gaußverteilung

Die mithilfe von Gl. (4.20) berechnete kritische Temperatur liegt bei $k_B T_C / E_1 = 1.82$.

↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑	Hier findet ein Phasenübergang von einer paramagnetischen zu einer "linienweisen" antiferromagnetischen Phase vor, wobei das Umklappen der Spin einer Reihe vom Vorzeichen der Kopplung $E_2(i)$ abhängt. Der Grundzustand ist spiegelbildlich entartet.
↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓ ↓	
↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑	
↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑	

a) Boundary-Suszeptibilität

$$k_B T \chi_b / L = \frac{1}{L^2} \sum_{i,j} \langle s_{1i} \cdot s_{1j} \rangle$$

Sie gibt die relative Ordnung der ersten Reihe an. Unterhalb T_C ist diese Reihe dahingehend geordnet, daß alle Spins in eine Richtung zeigen ($k_B T \chi_C / L = 1$). Der Wendepunkt in χ_C als Maß für T_C wandert erst mit zunehmender Systemgröße gegen den oben berechneten Wert (s. Fig. 4.1). Dies ist wohl damit zu erklären, daß die erste Reihe nach oben einen freien Rand besitzt und die Ankopplung an den Rest des Gitters damit nicht so stark ist.

(Fig. 4.2) zeigt die Abhängigkeit der Boundary-Suszeptibilität von einem äußeren nun an der 1. Reihe angreifenden Magnetfeld. Wegen der losen Anbindung an das Rest-Gitter baut sich die geordnete Phase oberhalb T_c recht langsam ab.

b) Spezifische Wärme

Die Lage des Maximums der spezifischen Wärme als Maß für T_c zeigt keine Größenabhängigkeit (s. Fig. 4.3). Es liegt ziemlich genau auf dem vorausberechneten Wert. Die Höhe des Maximums dagegen nimmt mit zunehmender Systemgröße etwas zu. Ein Rounding-Effekt infolge der Random-Kopplung ist gut zu erkennen.

Die Abhängigkeit der spezifischen Wärme vom Magnetfeld in der ersten Reihe verschwindet - wie leicht einzusehen - bei größeren Systemen vollends.

c) Boundary-Magnetisierung

(Fig. 4.4) zeigt M_b bei konstanter Temperatur $k_B T/E_1 = 1.2$ in Abhängigkeit des an die erste Reihe gekoppelten Magnetfeldes H . Die Systemgrößenabhängigkeit unterstützt die in a) gemachte Aussage, daß infolge der "losen" Anbindung der 1. Reihe erst bei sehr hohen Systemgrößen ein für $N \rightarrow \infty$ charakteristisches Verhalten in den magnetischen Boundary-Größen zu erwarten ist.

2. Teil

Die folgenden Resultate gelten für ein Gitter mit Doppel-Peak-Verteilung

Die kritische Temperatur liegt bei $k_B T_C / E_1 = 1.88$.

Hier findet ein Übergang von der paramagnetischen zu einer ferromagnetischen Phase statt, da das Vorzeichen von $E_2(i)$ stets positiv ist.

a) Boundary-Suszeptibilität

(Fig. 4.5) stellt $k_B T \chi_b / L$ in verschiedenen Systemgrößen dar. Der Effekt aus dem ersten Teil (Gaußverteilung), daß der Wendepunkt in χ_b mit der Systemgröße nach rechts wandert, ist hier nicht zu sehen. Vielmehr ähnelt das Verhalten von χ_b dem des Ordnungsparameters ψ^2 in einem Mattis-Spin-Glas (vgl. Fig. 3.2). Der Wendepunkt in der Kurve liegt auch ungefähr beim erwarteten T_C . Es zeigt sich, daß in diesem Fall schon kleinere Systeme den thermodynamischen Limes besser simulieren als bei der Gaußverteilung.

Es zeigt sich außerdem, daß das Verhalten der Boundary-Suszeptibilität doch stark von der gewählten Verteilung abhängt.

Im Falle der Gaußverteilung existieren sehr kleine Bindungen mit hoher Wahrscheinlichkeit. Im gewählten Gitter bedeutet dies, daß das System "fast" durchgeschnitten ist. Dieses "fast" Durchschneiden führt sicherlich zu einer Verringerung des gesamten Einflusses des Bulks auf den Rand und umgekehrt.

b) Spez. Wärme

Den Einfluß des Randes auf das System kann man in (Fig. 4.6) erkennen. Für ein 100x100-Gitter ist die spez. Wärme für verschiedene an den Rand angreifende Magnetfelder zu sehen. Während dieser Einfluß bei der Delta-Verteilung bei der gewählten Systemgröße noch deutlich zu erkennen ist, verschwindet er im Falle der Gaußverteilung fast völlig. Für $N \rightarrow \infty$ wird der Einfluß des Magnetfeldes wieder verschwinden.

Die spezifische Wärme (Fig. 4.7) hat für $H=0$ ihr Maximum bei $k_B T_C / E_1 = 1.88$, einem Wert, der mit dem nach (4.20) berechneten Wert übereinstimmt. Der Peak in der spezifischen Wärme ist weit

weniger gerundet als im Gaußschen Fall. Ein weiteres Indiz für den geringeren Einfluß der vorliegenden Deltaverteilung auf das Verhalten des Systems. Eine Delta-Verteilung wie (4.23) führt lediglich zu einer Verschiebung der kritischen Temperatur. Demgegenüber führt (4.22) doch zu einer starken Rundung des Peaks der spezifischen Wärme.

c) Boundary-Magnetisierung

(Fig. 4.8) zeigt, daß sich der Sättigungswert M_b bei gleicher Temperatur $k_B T/E_1 = 1.2$ schon bei viel kleinerem Magnetfeld H einstellt, als im Gaußschen Falle. Eine Vergrößerung des Systems unterstützt noch diesen Effekt. (Fig. 4.9) stellt für ein 200×200 -System die Boundary-Suszeptibilitäten dar. Für $T > T_c$ hat man hier ein stärkeres Abfallen der Kurven für ansteigendes H im Gegensatz zum Gaußschen Fall, was die oben gemachten Aussagen unterstützt.

Abschließend läßt sich sagen, daß die nach Gl. (4.20) berechnete kritische Temperatur von den numerischen Resultaten in beiden Fällen verifiziert wird. Der "Rounding"-Effekt bei der spezifischen Wärme ist von der jeweiligen Verteilung stark abhängig. Das gegebene System zeigt für jede beliebige Verteilung einen Phasenübergang.

Figurenbeschreibung:

- Fig. 4.1 Boundary-Suszeptibilität, $k_B T \chi_b / L$ gegen Temperatur für verschiedene L (Gaußverteilung).
- Fig. 4.2 Boundary-Suszeptibilität $k_B T \chi_b / L$ gegen Temperatur für verschiedene an der ersten Reihe angreifende Magnetfelder H/E_1 (Gaußverteilung).
- Fig. 4.3 Spezifische Wärme gegen Temperatur für verschiedene L (Gaußverteilung).
- Fig. 4.4 Boundary-Magnetisierung M_b bei konstanter Temperatur $k_B T/E_1=1.2$ gegen Magnetfeld in erster Reihe für verschiedene L (Gaußverteilung).
- Fig. 4.5 Boundary-Suszeptibilität $k_B T \chi_b / L$ gegen Temperatur für verschiedene L (Doppel-Peak-Verteilung).
- Fig. 4.6 Spezifische Wärme gegen Temperatur für verschiedene Magnetfelder H/E_1 an erster Reihe für ein 100×100 Gitter (Doppel-Peak-Verteilung).
- Fig. 4.7 Spezifische Wärme für $H=0$ gegen Temperatur für verschiedene L (Doppel-Peak-Verteilung).
- Fig. 4.8 Boundary-Magnetisierung M_b bei konstanter Temperatur $k_B T/E_1=1.2$ gegen Magnetfeld H/E_1 an der ersten Reihe für verschiedene L (Doppel-Peak-Verteilung).
- Fig. 4.9 Boundary-Suszeptibilität $k_B T \chi_b / L$ gegen Temperatur für verschiedene H/E_1 (Doppel-Peak-Verteilung).

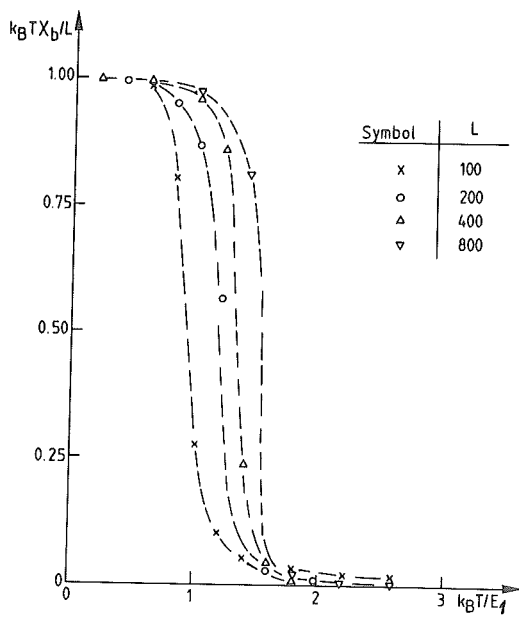


Fig. 4.1

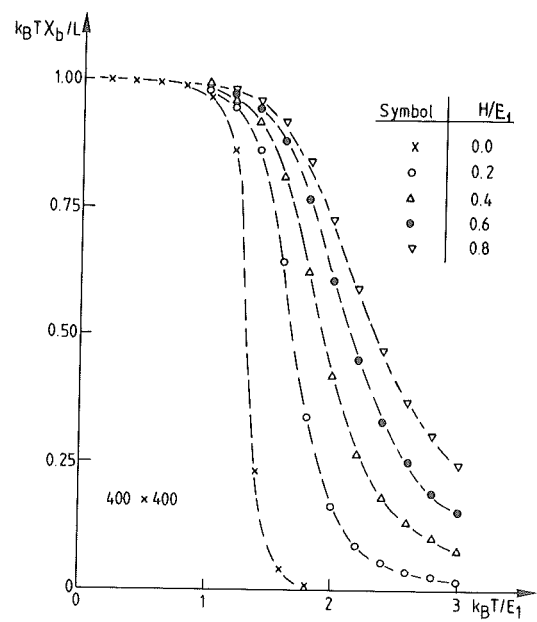


Fig. 4.2

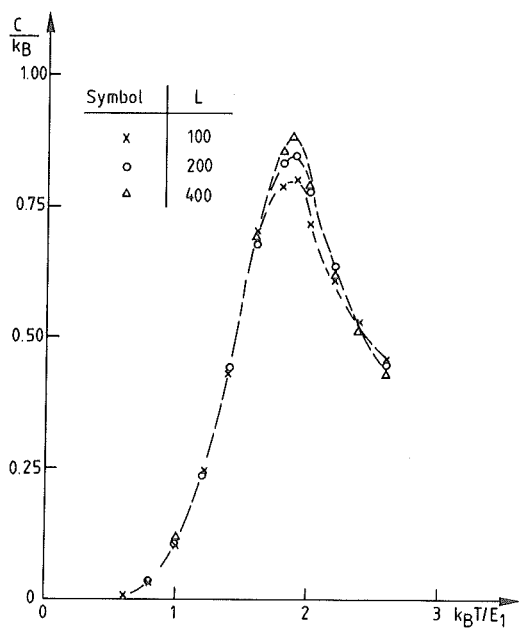


Fig. 4.3

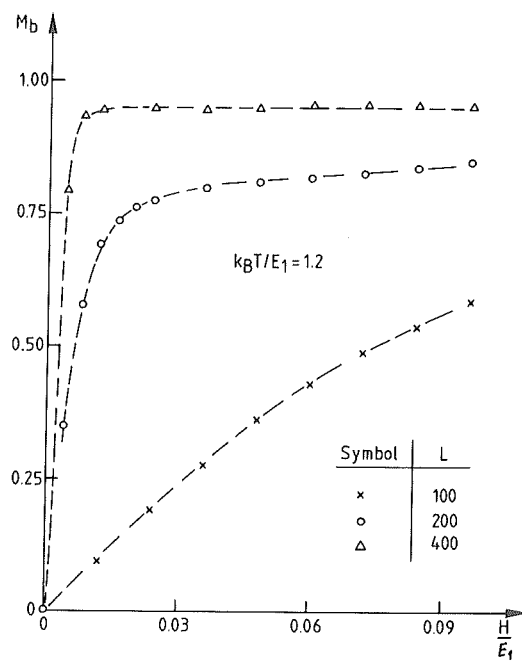


Fig. 4.4

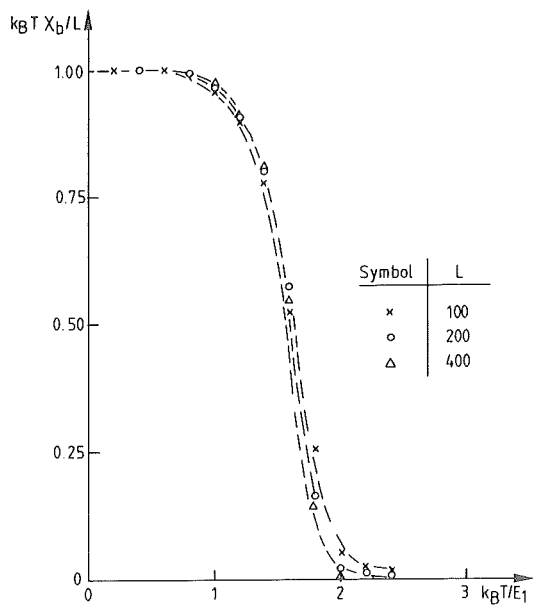


Fig. 4.5

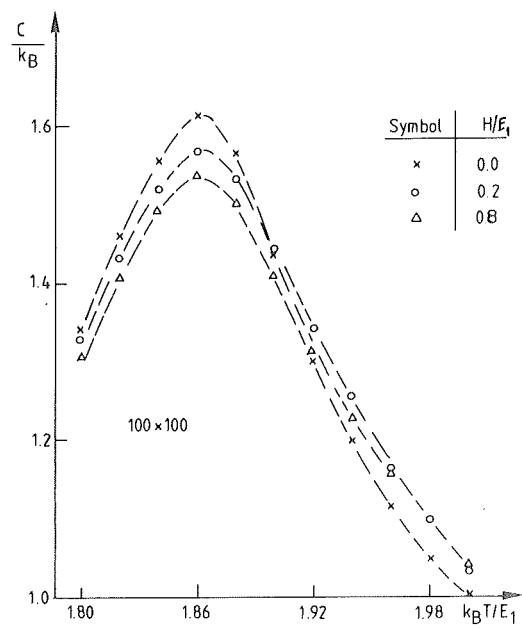


Fig. 4.6

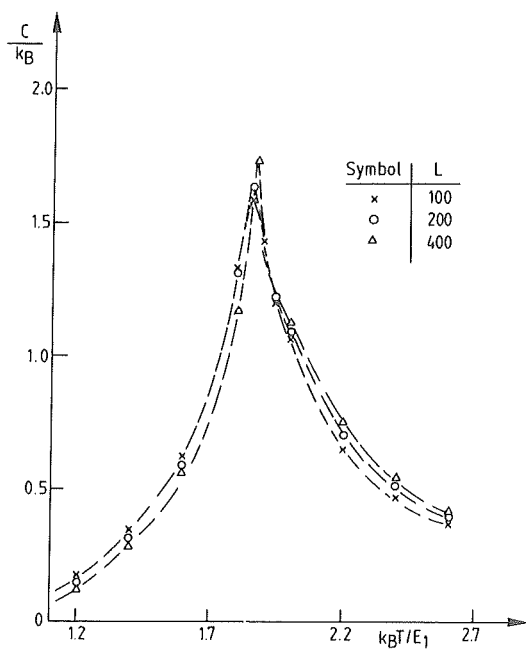


Fig. 4.7

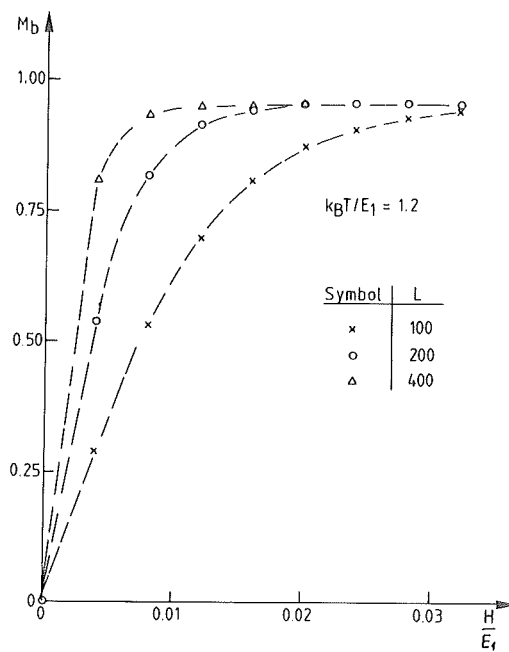


Fig. 4.8

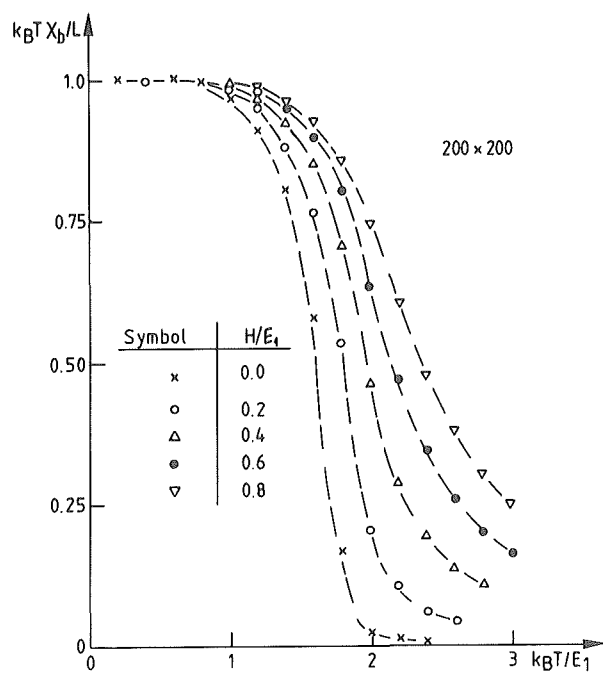


Fig. 4.9

KAPITEL 5

Das zweidimensionale Ising-Modell im Random-Magnetfeld

In diesem Kapitel wird die statistische Mechanik von $L \times L$ -Ising-Gittern in einem Feld $\pm h$ mit Random-Vorzeichen mithilfe der "Transfermatrix-Methode" untersucht. Die Gittergröße liegt wieder bei $6 \leq L \leq 16$. Die Resultate sind konsistent mit der Abwesenheit einer spontanen Magnetisierung für $h \neq 0$ (sogar im Grundzustand). Die bei $T=0$ im Bereich $0 \leq h \leq 4J$ (J ist die Kopplungskonstante) auftretenden Singularitäten werden mithilfe einer Cluster-Entwicklung untersucht. Da die Korrelationslänge für $h \rightarrow 0$ divergiert, solange T kleiner als die kritische Temperatur des "reinen" zweidimensionalen Ising-Modells ist, wird das Verhalten für kleine h von einer Rundung des Übergangs, die von der Random-Verteilung des Feldes herrührt, sehr gut beschrieben.

a) Einleitung

Systemen mit "quenched random disorder" ist in der letzten Zeit ein großes Interesse entgegengebracht worden /59/. Von speziellem Interesse ist der Fall randomverteilter Magnetfelder /60-70/.

i) Für den Fall der Spin-Dimension $n \geq 2$ wurde gezeigt, daß die ferromagnetische Ordnung gegen beliebig kleine Random-Felder instabil für Systeme ist, deren Dimension d kleiner (oder gleich) $d_c=4$ /60,63,65/, während im Ising-Fall ($n=1$) die untere kritische Dimension $d_c=2$ /60/ ist. Für $n \geq 2$ sind die kritischen Exponenten des d -dimensionalen Systems gleich denen des entsprechenden "reinen" Problems in $d-2$ Dimensionen /62-68/. Die Skalengesetze sind entsprechend modifiziert /61/. Im Ising-Fall ist wenig über das kritische Verhalten in den physikalischen Dimensionen $d=2,3$ bekannt /60,67/.

(ii) Für genügend große Random-Felder ist ein interessantes multikritisches Verhalten vorausgesagt /66/.

iii) Eine experimentelle Realisierung dieser Systeme kann mit ungeordneten Antiferromagneten ("site disorder" in einem uniformen Magnetfeld) erzielt werden /68-70/. Die vorliegende Arbeit behandelt den Ising-Fall in zwei Dimensionen, also genau bei der unteren kritischen Dimension. Hier erwartet man, daß bei von Null verschiedenem Random-Feld $\pm h$ keine spontane Magnetisierung auftritt. Für $h=0$ hingegen tritt der bekannte Phasenübergang des Onsager-Gitters bei $k_B T_C \approx 2.27$ auf /73/. Es ist allerdings unbekannt, ob der Übergang Paramagnet-Ferromagnet bei $h=0$ für alle $T < T_C$ auftritt, oder ob dagegen ein Übergang bei $h_C(T) > 0$ von einer paramagnetischen Phase zu einer Phase mit einem Potenzabfall der Korrelationsfunktionen existiert. Die letztere Möglichkeit tritt im zweidimensionalen Ising-Modell auf /74/, bei dem es sich ebenfalls um ein System handelt, das sich an seiner unteren kritischen Dimension befindet. In beiden Fällen ist der Crossover der Korrelationsfunktionen zu der spontanen Magnetisierung für $h \rightarrow 0$ sehr interessant.

Da im Augenblick keine besseren Techniken zur Verfügung stehen, wurde auf das Random-Field-Problem ebenfalls die in Kapitel 1 beschriebene "Transfermatrix-Methode" angewandt /75,76/. Im Unterabschnitt b) wird das Verhalten des Modells bei $T=0$ untersucht. Die "Cluster-Entwicklungen" werden analog den Rechnungen im eindimensionalen Fall vorgenommen /77/. 5c) enthält die Resultate für $T > 0$.

b) Grundzustands- und Tieftemperatur-Eigenschaften des Random-Field-Modells

Wir betrachten den Ising-Hamiltonian:

$$-\beta \mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \sum_i h_i s_i \quad (5.1)$$

wobei J die Kopplungskonstante ist, die Summation $\langle i, j \rangle$ über die nächsten Nachbarn läuft, und h_i eine ("eingefrorene") Random-Variable ist, die der Verteilung

$$P\{h_i\} = \frac{1}{2} \left\{ \delta(h_i - h) + \delta(h_i + h) \right\} \quad (5.2)$$

gehört.

Wir betrachten nun eine Domäne von n Spins und bezeichnen mit $\frac{n}{2}(1+y)$ die Anzahl der Spins innerhalb der Domäne, in der das Random-Feld ein negatives Vorzeichen hat. y soll eine kleine Abweichung von Fall $\frac{n}{2}$ darstellen. Es läßt sich leicht zeigen, daß für genügend große n die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines speziellen y eine Gauß-Verteilung approximiert.

$$P\{y\} = \sqrt{\frac{n}{2\pi}} \exp(-ny^2/2) \quad (5.3)$$

Solange die Domäne von quadratischer Form ist, und die Spins in der Umgebung nach oben zeigen, gilt für die Energie, die notwendig ist, um die Domäne umzudrehen:

$$\Delta E = 4J\sqrt{n} - nyh \quad (5.4)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß $\Delta E < 0$

$$\begin{aligned} P\{\Delta E < 0\} &= \int_{4J/(h\sqrt{n})}^{\infty} dy P\{y\} = \\ &= \int_{4J/h}^{\infty} \exp(-t^2/2) dt \end{aligned} \quad (5.5)$$

Gleichung (5.5) zeigt, daß $P(\Delta E > 0)$ von Null verschieden und unabhängig von n ist. Für kleine h vereinfacht sich Gl. (5.5) zu

$$P\{\Delta E < 0\} \approx \exp\left\{-\frac{(4J/h)^2}{2}\right\} \quad (5.6)$$

wobei Vorfaktoren vernachlässigt werden. Damit ist die Größe einer Domäne N , die im Mittel eine "Unterdomäne" mit n umgedrehten Spins aufweist, gegeben durch

$$N/n = 1/P\{\Delta E < 0\} = \exp \left\{ (4J/h)^2 / 2 \right\} \quad (5.7)$$

Fig. (5.1) illustriert diese Argumentation. Große Domänen mit Spins nach oben enthalten wieder kleinere Domänen mit Spins nach unten, die wiederum kleinere Domänen mit Spins nach oben enthalten, usw. Die Dichte dieser "falsch" orientierten Unterdomänen in jeder Domäne geht exponentiell gegen Null, wenn $h \rightarrow 0$ (Gl. 5.7).

Die minimale Domänengröße erhält man von Gl. (5.7), indem man $N=N_{\min}$ und $n=1$ setzt. Da Gl. (5.7) nur das Verhältnis zwischen verschiedenen "Generationen" der Domänengrößen enthält, existiert in diesem Problem keine andere charakteristische Länge. Nach einer längeren Rechnung ergibt sich folgendes Verhalten:

$$\langle S_0 S_l \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(v \cdot l)^n}{n!} e^{-v \cdot l} = e^{-2v \cdot l} \quad (5.8)$$

Dabei ist v die Anzahl der Wände pro Längeneinheit, die zwischen den $+$ und $-$ Domänen auftreten. Gl. (5.8) gilt natürlich nur für Abstände größer als $a \cdot \exp\{4J^2/h^2\}$, wobei a die Gitterkonstante ist. Für kleinere Abstände ist die Korrelationsfunktion im wesentlichen gleich Eins.

Ein analoges Verhalten kann man für Temperaturen größer Null und kleiner T_c erwarten (Fig. 5.2). Die Korrelationsfunktion fällt von Eins zum Quadrat der Magnetisierung des reinen Systems ab, wobei der auftretende Abstand der Spins im wesentlichen mit der Korrelationslänge des reinen Problems, ξ_{pure} , übereinstimmt.

Auf einer weitgrößeren Längenskala, die der Korrelationslänge $\xi^{\text{random}}(h)$ des ungeordneten Systems entspricht, fällt die Korrelationslänge zu Null ab.

Während diese Betrachtungen über das Verhalten des Systems bei schwachen Random-Feldern mehr von qualitativer Natur sind, können die Resultate für größere Felder genau bestimmt werden.

Für $h > 4J$ folgen alle Spins ihrem Random-Feld, da die innere Energie E pro Spin gleich $E = -h$ ist. Die Magnetisierung M_r , die entlang der lokalen Richtung des Random-Feldes gemessen wird, ist Eins, während für die ferromagnetische Suszeptibilität

$$k_B T \chi_f = \left\{ \sum_{i,j} \langle s_i s_j \rangle_T - \langle s_i \rangle_T \langle s_j \rangle_T \right\}_{av} / N \quad (5.9)$$

gilt für $T \rightarrow 0$:

$$k_B T \chi_f = \sum_i \{ 1 - \langle s_i \rangle^2 \}_{av} / N = 0 \quad (5.10)$$

Für $h = 4J$ hingegen, werden die Spins, die, wenn sie dem Random-Feld folgen wollen, vier Bonds brechen müssen, effektiv entkoppelt (Fig. 5.3a), d.h. sie können ohne Energie drehen. Da die Wahrscheinlichkeit für eine solche in (Fig. 5.3a) gezeigte Konfiguration gleich $\left(\frac{1}{2}\right)^5$ ist, aber zwei solche Konfigurationen wegen des Spiegelbildes existieren, finden wir, daß bei $h = 4J$ ein Anteil von $1/16$ aller Spins lose ist, d.h. $\langle S_i \rangle = 0$, da alle diese Spins ohne Energiekosten drehen können. Damit erhalten wir für M_r , Suszeptibilität und Entropie:

$$\begin{aligned} M_r &= 15/16 \\ k_B T \chi_f &= 1/16 \\ S/h_B &= \ln 2/16 \end{aligned} \quad (h=4J) \quad (5.11)$$

Für $3J < h < 4J$ ist der zentrale Spin der Konfiguration (Fig. 3a) nicht länger lose, sondern antiparallel zum Random-Feld eingestellt. Damit ist

$$\begin{aligned} M_r &= 7/8, \quad E = -h - (4J - h)/16 \\ k_B T \chi_f &= 0 \\ S/h_B &= 0 \end{aligned} \quad (5.12)$$

Analog wird für $h = 3J$ ein Cluster mit zwei Spins in der in (Fig. 3b) gezeigten Konfiguration effektiv entkoppelt. Die Wahrscheinlichkeit für diese Random-Field-Konfiguration

ist $(1/2)^8$, und es existieren 4 äquivalente Konfigurationen. Damit folgt:

$$\begin{aligned} M_r &= 27/32 \\ k_B T \chi_f &= 1/16 \\ S/h_B &= \ln 2/64 \quad h=3J \end{aligned} \quad (5.13)$$

Für $8J/3 < h < 3J$ sind diese Cluster nicht länger lose, sondern wieder antiparallel zum Random-Feld eingestellt:

$$\begin{aligned} M_r &= 13/16 \\ E &= -h - (4J-h)/16 - (6J-2h)/64 \\ k_B T \chi_f &= S/h_B = 0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

Für $h=8J/3$ haben wir lose Dreiercluster (Fig. 3c).

$$\begin{aligned} M_r &= 401/512 \\ k_B T \chi_f &= 45/512 \\ S/h_B &= 5 \ln 2/512 \quad (h=8J/3) \end{aligned} \quad (5.15)$$

während für $5J/2 < h < 8J/3$

$$\begin{aligned} M_r &= 193/256 \\ E &= -h - (4J-h)/16 - (6J-2h)/64 - (8J-3h)5/512 \end{aligned} \quad (5.16)$$

Bei $h=5J/2$ haben wir lose Vierercluster:

$$\begin{aligned} M_r &= 747/1024 \\ k_B T \chi_f &= 25/256 \\ S/h_B &= 25 \ln 2/4096 \end{aligned} \quad (5.17)$$

während für $12J/5 < h < 5J/2$ sich diese Vierercluster wieder antiparallel zum Random-Feld einstellen:

$$M_r = 361/512 \quad (5.18)$$

$$E = -h - (4J-h)/16 - (6J-2h)/64 - (8J-3h)5/512 - (10J-4h)25/4096$$

Bei $h=12J/5$ werden Fünfercluster lose (Fig. 3e):

$$\begin{aligned} M_r &= 22479/32768 \\ k_B T \chi_f &= 3125/32768 \\ S/h_B &= 125 \ln 2/32768 \end{aligned} \quad (5.19)$$

während für $7J/3 < h < 12J/5$

$$\begin{aligned} M_r &= \frac{10927}{15384} \\ E &= -h - (4J-h)/16 - (6J-2h)/64 - (8J-3h)5/512 - \\ &\quad - (10J-4h)9/1024 - (12J-5h)125/32768 \end{aligned} \quad (5.20)$$

usw.

Es ist nach diesen Ausführungen leicht zu realisieren, daß die kritischen Werte R_c des Verhältnisses $R \equiv h/J$ gegeben sind mit:

$$R_c = p_n^{(\gamma)} / n, \quad (5.21)$$

wobei $p_n^{(\gamma)}$ der Bond-Perimeter eines Clusters des Typs γ ist, der n Gitterplätze enthält. Der Bond-Perimeter ist die Anzahl der Nächste-Nachbarn-Bindungen, die die Spins innerhalb des Clusters mit dem Restgitter verbinden /78/. Der maximale Perimeter ist gegeben für Cluster, in denen die inneren Bonds keine Loops bilden (ramified clusters). Dieser Perimeter ist:

$$\begin{aligned} p_n^{(\text{ramified})} &= 2n+2, \\ \Rightarrow R_c^{(\text{ramified})} &= 2+2/n \end{aligned} \quad (5.22)$$

Damit ergibt sich eine unendliche, aber abzählbare Anzahl von Singularitäten im Bereich $2 < R \leq 4$. Zwischen diesen Singularitäten sind alle thermodynamischen Größen konstant (M_r , $k_B T \chi_f$, S) oder variieren linear mit R (innere Energie E), vgl. (Fig. 5.4).

Bei von Null verschiedener Temperatur werden diese Singularitäten abgerundet, aber bei noch genügend tiefen Temperaturen erwarten wir ein Verhalten von $k_B T \chi$, S (ebenfalls $\partial M_r / \partial h$, $\partial E / \partial h$), das diese Singularitäten im Grundzustand noch widerspiegelt (Fig. 5.4).

Dieses Verhalten entspricht dem im eindimensionalen Fall /77/, wo allerdings die Singularitäten bei $h/J=2/n$, $n=1,2,3\dots$ auftreten; das beschriebene Verhalten also bis $h \rightarrow 0$ auftritt. In unserem Fall allerdings ändert sich das Verhalten der thermodynamischen Größen qualitativ beim kritischen Feld der Mean-Field-Theorie /78/, $R_c=2$.

Für $0 < R \leq 2$ treten die Singularitäten bei jeder rationalen Zahl für R auf. Dieser Schluß läßt sich nach dem Studium von Clustern mit geschlossenen Loops (Fig. 5.3 f,g) ziehen. Die kompaktesten Cluster sind Quadrate (Fig. 5.3 f). Der auftretende Perimeter ist

$$p_n^{(\text{square})} = 4\sqrt{n} \Rightarrow R^{(\text{square})} = 4/\sqrt{n} \quad (5.23)$$

Dabei muß \sqrt{n} eine natürliche Zahl sein. Genau wie die "ramified" Cluster unendlich viele Singularitäten für $R \rightarrow 2^+$ hervorrufen, geschieht dies bei den Quadraten für $R \rightarrow 0^+$. Analog gilt für Rechtecke (Fig. 5.3 g) mit den Lineardimensionen m, k ($m > k > 1$):

$$\begin{aligned} n &= m \cdot k \\ p_n &= 2m+2k \Rightarrow R_c = \frac{2k+2m}{m \cdot k} \end{aligned} \quad (5.24)$$

Für allgemeines $n=m \cdot k + \ell$ ist die kompakteste Konfiguration durch ein Rechteck mit den Lineardimensionen m, k gegeben, wobei eine Seite eine Ausbuchtung mit einem Abstand ℓ von der Ecke mit der Lineardimension $m+1$ hat. Der entsprechende Perimeter ($k > 1$) ist dann:

$$p_n^{(\text{compact})} = 2m+2k+2 \Rightarrow R_c = \frac{2k+2m+2}{m \cdot k + \ell} \quad (5.25)$$

Weitere Ausbuchtungen an der Oberfläche des Clusters lassen den Perimeter in Schritten von 2 pro Ausbuchtung anwachsen. Geht man vom minimalen Perimeter in (Gl. 5.25) aus, so erscheinen alle geraden natürlichen Zahlen im Zähler von (Gl. 5.25) bis zu einem maximalen Wert, der dann erreicht wird, wenn in den Clustern keine geschlossenen Loops mehr auftreten ("ramified clusters") (Gl. 5.22).

Diese "ramified clusters" mit einem zusätzlichen geschlossenen Loop haben den Perimeter

$$p_n = 2n \Rightarrow R_c = 2 . \quad (5.26)$$

Dieses Resultat zeigt, daß keine weiteren Singularitäten für $R > 2$ auftreten. Es existieren nur die in (Gl. 5.22) aufgeführten. Im Falle $R < 2$ hingegen können für jede rationale Zahl $R = v/\mu$ (v, μ natürliche Zahlen) Cluster konstruiert werden, die für das gegebene R ohne Energieaufwand umklappen können: wir wählen $n = j \cdot v$, $p_n = j \cdot \mu$, wobei j eine gerade natürliche Zahl ist. Die Gleichungen $jv = mk + l$, $j\mu = 2k + 2m + 2i$ wobei i eine natürliche Zahl ist, die die Anzahl der Ausbuchtungen des Clusters zählt, haben offensichtlich immer Lösungen für R im gegebenen Bereich. Ein ausgeprägter Effekt in den thermodynamischen Größen ist dagegen für jene R zu erwarten, für die relativ kleine Cluster umklappen können, da die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Clusters sehr stark mit dessen Größe abnimmt. Damit ist auch klar, daß ausgeprägte Effekte für $R=2$, $R=5/3$ (wo der Cluster aus Fig. 5.3 g beiträgt), $R=4/3$ (Gl. 5.23, $n=9$), $R=3/2$ (Gl. 5.24, $k=2$, $m=4$) zu erwarten sind.

Während die Cluster-Entwicklung relativ gute Resultate für die Grundzustände für $R > 2$ liefert, lassen die obigen Betrachtungen für $R < 2$ keine expliziten Resultate zu. Die "Transfermatrix-Methode" aus Kapitel 1 kann jedoch leicht angewendet werden. Fig. 5.5 zeigt, daß die Grundzustandsenergie doch stark von den Mean-Field-Resultaten für $R \gtrsim 1$ abweicht. Ein Wert $E/J = -2$ wird für $h \rightarrow 0$ erreicht. Fig. 5.5 zeigt, daß die Domänen-Effekte aus Fig. 5.1, die die ferromagnetische Ordnung zerstören, für

kleine h nur wenig zur inneren Energie beitragen. Fig. 5.6 zeigt das Verhalten von $k_B T \chi_f$ und M_r . Diese Resultate wurden bei der Temperatur $k_B T/J=0.2$ berechnet, d.h. ungefähr bei 9% der kritischen Temperatur des reinen Systems. Wir erwarten aber, daß die Resultate für $T=0$ gleich ausfallen. Dieses Ausweichen auf die etwas höhere Temperatur ist wegen des bei kleineren Temperaturen in der "Transfermatrix-Methode" auftretenden "Overflow-Effektes" (s. Kapitel 1) notwendig. Die Resultate für M_r zeigen keine besonders ausgeprägte Systemgrößenabhängigkeit, und wir schließen daraus, daß die Resultate schon gut jene des unendlichen Gitters approximieren. Es zeigt sich, daß bei der gegebenen Temperatur die Singularitätseffekte bereits herausgeglättet werden. Die auftretenden "Einbrüche" in den M_r -Werten zwischen $1 < h/J < 2.5$ sind wahrscheinlich auf diese Singularitäten bei $T=0$ zurückzuführen. Für $h/J \lesssim 1$ ist M_r sehr klein. Statistische Ungenauigkeiten und die Kleinheit der Gitter lassen keinen Schluß zu, ob M_r Singularitäten für ein Feld h für $T>0$ besitzt oder nicht. Während die Mean-Field-Theorie einen Übergang zur ferromagnetischen Phase für $h/J=2/66$ ergibt, zeigen unsere Resultate (Fig. 5.4 c, 5.6), daß die Suszeptibilität bei diesem Feld noch sehr klein ist und dagegen bei $h/J \approx 1$ erst stark ansteigt. Die Sättigung von $k_B T \chi/N$ in Fig. 5.6 für kleine h zeigt, daß eine fast perfekte ferromagnetische Korrelation für $L=6,8$ existiert. Dies ist konsistent mit (Gl. 5.7). (Fig. 7) hingegen zeigt, daß die Felder, bei den $k_B T \chi_f$ sättigt, mit anwachsender Systemgröße L kleiner werden. Dieses Resultat ist konsistent mit der Abwesenheit einer spontanen Magnetisierung $M \{ \lim_{N \rightarrow \infty} k_B T \chi_f / N = M^2 \}$ für $h>0$.

c) Suszeptibilität und spezifische Wärme

Die Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität $k_B T \chi_f / N$ wird in (Fig. 5.8) für verschiedene Werte des Random-Feldes gezeigt. Für $h/J=0.5$ ist das Verhalten nur schwer vom Fall $h=0$ zu unterscheiden /75/. Nur die "effektive kritische Temperatur" fällt von $k_B T_c / J = 2.27$ für den reinen Fall auf $k_B T_c^{\text{eff}} / J \approx 2.0$ ab. Für $h/J = 0.75$ ist das Verhalten analog mit $k_B T_c^{\text{eff}} / J \approx 1.8$.

Während hier die Kurven für $L=6,8$ ziemlich identisch sind, liegt die Kurve für $L=12$ schon tiefer. Dieser Umstand zeigt an, daß die Daten tatsächlich nicht zu einem von Null verschiedenen M^2 für $N \rightarrow \infty$ konvergieren. In Fig. 8b ist eher das starke Abfallen der ferromagnetischen Korrelationslänge als die Existenz einer spontanen Magnetisierung zu erkennen. Es ist jedoch unklar, ob $k_B T \chi_f$ überhaupt bei irgendeiner Temperatur divergiert (vielleicht bei $T=0$), oder ob die einzige Divergenz im Grenzfall $h \rightarrow 0$ auftritt. Bei $h/J=1.0$ liegt die Kurve für $L=12$ sogar bei tiefen Temperaturen schon sehr viel tiefer als die Kurven für die beiden kleineren Systeme, die bei tiefen Temperaturen nahezu identisch sind. Bei $h/J=1.25$ ist Größenabhängigkeit von $k_B T \chi_f / N$ bei allen betrachteten L sehr gut zu sehen. Wir schließen daraus, daß die ferromagnetische Korrelationslänge für $h/J=1.0$ oberhalb einer Länge von 12 Gitterkonstanten sättigen muß. Dagegen ist diese Sättigung bei $h/J=1.25$ schon für eine Länge von 6 oder sogar weniger Gitterkonstanten erreicht.

Fig. 5.9 zeigt die innere Energie und Fig. 5.10 die spezifische Wärme des Modells. Für $h/J \gtrsim 1.0$ tritt eine Größenabhängigkeit der spezifischen Wärme auf. Die Daten zeigen einen breiten Peak aufgrund der Schottky-Anomalie. Dieses Resultat ist konsistent mit der oben gemachten Aussage, daß die ferromagnetische Korrelationslänge nicht sehr große Werte erreicht. Es existiert also kein gerundeter Phasenübergang, sondern nur eine kurzreichweitige Ordnung. Für $h/J=0.5$ hingegen wächst der Peak der spezifischen Wärme bei $k_B T_c^{\text{eff}} \approx 2.0$ mit L an und wird schärfer. Der gleiche Sachverhalt tritt bei $h/J = 0.75$ auf (Fig. 5.11). In beiden Fällen kann kein Sättigungseffekt erkannt werden. Damit sind zwei Schlüsse möglich, es kann ein gerundeter Übergang bei $T_c^{\text{eff}}(h)$ auftreten, bei dem einmal die Korrelationslänge ξ bei einem weit größeren Wert als 12 sättigt, oder daß zum anderen beide ξ und C tatsächlich divergieren. Diese Situation entspräche dem modifizierten Skalengesetz von Grinstein /61/ $(d-2) \cdot \nu = 2 - \alpha$ nur für $\nu \rightarrow \infty$, wobei ν der Exponent der Korrelationslänge, α der der spezifischen Wärme und d die Dimension ist. Eine triviale Aussage für α ist nicht möglich, im Gegensatz zum XY-Modell, wo $\nu = \infty$ etabliert ist /74/. Damit erhält man mit dem

Standard-Skalen-Gesetz $d\nu=2-\alpha$ für α den Wert $\alpha=-\infty$, d.h. die spezifische Wärme divergiert nicht, und nur ein breiter Schottky-Peak ist zu sehen /79/.

Fig. 5.12 vergleicht unsere Daten mit denen der Mean-Field-Theorie /66/. Eine ferromagnetische Phase existiert nur für $h=0$. Für von Null verschiedene aber noch genügend kleine h wird ein "Übergang" zu einem quasi-ferromagnetischen Zustand beobachtet, in dem die Magnetisierung noch immer vollständig im Domänen von ziemlicher Größe sättigt. Der Übergang zu diesem Zustand kann entweder ein gerundeter (gradueller) Übergang oder ein Phasenübergang zu einem Zustand mit einem Potenzabfall für die Korrelationsfunktionen sein. Der in der Mean-Field-Theorie gefundene trikritische Punkt hat wohl keine Bedeutung für die Interpretation unserer Resultate.

Mithilfe der "Transfermatrix-Methode" können ebenfalls die Korrelationsfunktionen $\langle S_O S_R \rangle^2$ berechnet werden. Dazu ist eine einfache Modifikation der in Kapitel 1 beschriebenen Methode notwendig. Während bei den Spin-Glas-Modellen die beiden Spiegelbilder einer Spin-Konfiguration das gleiche statistische Gewicht haben, trifft dies bei auftretenden Random-Feldern nicht mehr zu. Die bei den Spingläsern durchgeführte Separierung der Konfigurationen bei nur einem Lauf kann hier erst nach einem zusätzlichen Lauf mit umgedrehten Random-Feldern erfolgen.

Fig. 5.13 zeigt $\langle S_O S_R \rangle^2 - M_R^2$ für verschiedene Realisierungen h/J bei fester Temperatur $k_B T/J = 1.0$. Wegen der möglicherweise auftretenden Entartungseffekte wurden bei den Rechnungen die auftretenden "glatten" Werte für h/J um ein ϵ verschoben. Die Kurve zeigt, daß bei Korrelationen ein Plateau für größere R erreichen. Dieses Plateau sinkt bei zunehmendem Random-Feld weiter ab. Fig. 5.14 zeigt den aus Fig. 5.13 abgeleiteten Ordnungsparameter $q^2 - M_R^2$, wobei q den Edwards-Anderson-OP darstellt. Eine Bereinigung um M_R^2 ist in beiden Kurven nötig, weil sich bei genügend großen Random-Feldern nach Fig. 5.6 eine neue Ordnung in Richtung des Random-Feldes einzustellen beginnt. Fig. 5.14 zeigt,

daß $q^2 - M_R^2$ für ein kritisches Feld verschwindet. Dieser Punkt ist aus der Zeichnung nur ungefähr zu bestimmen, jedoch ist anzunehmen, daß der in den bisherigen Rechnungen besonders ausgezeichnete Punkt $h/J = 2.0$ das kritische Feld darstellt.

Figurenbeschreibung:

- Fig. 5.1 Domänen im Grundzustand bei kleinem Random-Feld (schematisch). Pfeile zeigen Orientierung der Domänen an.
- Fig. 5.2 Erwarteter Abfall der gemittelten Spin-Korrelationsfunktion bei einer Temperatur, bei der für $h=0$ eine spontane Magnetisierung M auftritt (schematisch).
- Fig. 5.3 Lokale Random-Field-Konfigurationen, die bei $T=0$ zu den im Text beschriebenen Singularitäten führt. Pfeile geben Orientierung des Random-Feldes bei jedem Spin an. Spins, die einen losen Cluster bei singulärem Feld bilden, sind durch gerade Linien miteinander verbunden.
- Fig. 5.4 Abhängigkeit von $M_r(A)$, innerer Energie (B), Suszeptibilität (C) und Entropie (D) von $R \equiv h/J$. Die Pfeile zeigen an, wo Singularitäten bei $T=0$ auftreten. Gestrichelte Kurven in A, C, D zeigen qualitativ das Verhalten für $T \ll T_c$.
- Fig. 5.5 Grundzustands-Energie gegen Random-Feld für verschiedene $L \times L$ -Gitter. Gestrichelte Kurve zeigt erwartetes Verhalten für $L \rightarrow \infty$. Durchgezogene Kurve Mean-Field-Approximation.
- Fig. 5.6 Suszeptibilität $k_B T \chi_f$ (links) und Magnetisierung M_r in Random-Feld-Richtung (rechts) gegen Random-Feld h/J bei $k_B T/J = 0.2$. Fehlerbalken von ungefähr 70 Konfigurationen für 6×6 , 40 für 8×8 und 30 für 12×12 .
- Fig. 5.7 Suszeptibilität $k_B T \chi_f$ (a) oder Quadrat der spontanen Magnetisierung (b) gegen Random-Feld bei $k_B T/J = 0.2$ und verschiedenen Gittergrößen.

- Fig. 5.8 Suszeptibilität $k_B T \chi_f / N$ gegen Temperatur für $h/J = 0.5$ (a), 0.75 (b), 1.0 (c) und 1.25 (d). Verschiedene Systemgrößen.
- Fig. 5.9 Innere Energie/Spin gegen Temperatur für ein 8×8 Gitter bei verschiedenen Random-Feldern.
- Fig. 5.10 Spezifische Wärme gegen Temperatur für verschiedene Random-Felder und $L=6$ (70 Konfigurationen) (a), $L=8$ (40 Konfigurationen) (b), $L=12$ (30 Konfigurationen) (c).
- Fig. 5.11 Log-log-Darstellung: Maximum der spezifischen Wärme gegen Lineardimension des Systems für verschiedene Random-Felder.
- Fig. 5.12 Phasendiagramm für das Random-Field-Modell. Vergleich mit Mean-Field-Approximation /8/.
- Fig. 5.13 Korrelationsfunktion $\langle S_O S_R \rangle^2$ für verschiedene h/J bei konstanter Temperatur $k_B T/J = 1.0$ gegen R aufgetragen.
- Fig. 5.14 Edwards-Anderson-Ordnungsparameter q^2 gegen h/J .

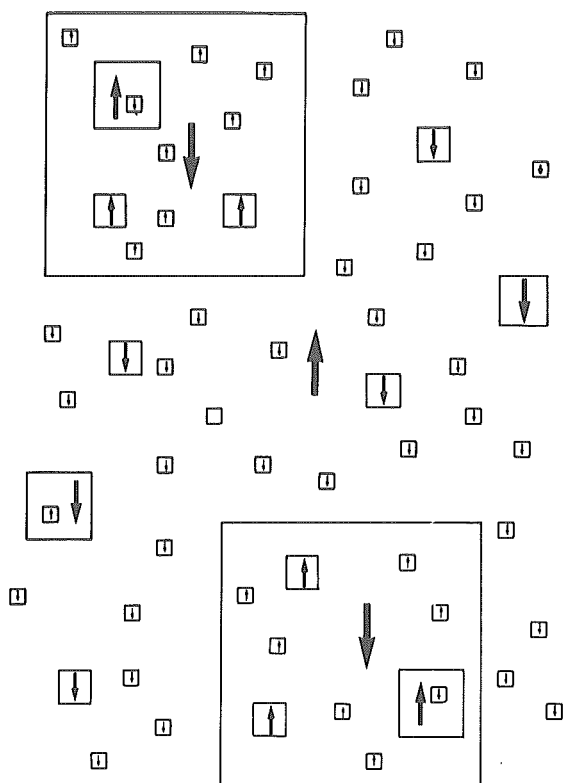
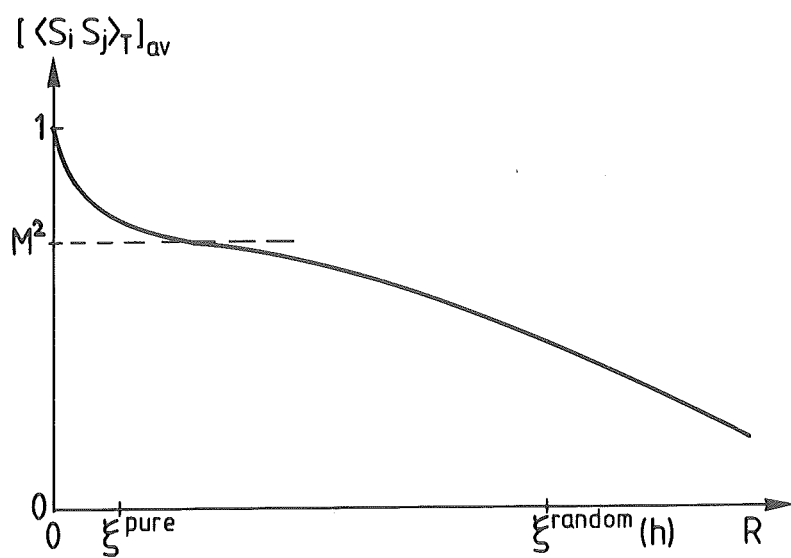


Fig. 5.1

Fig. 5.2



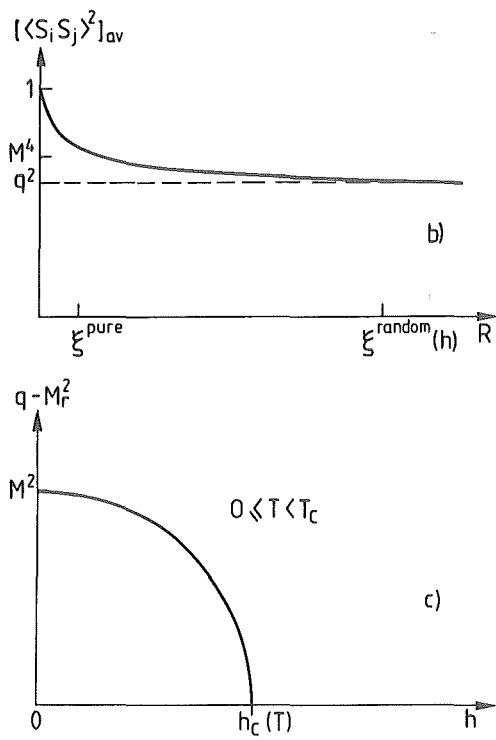


Fig. 5.2

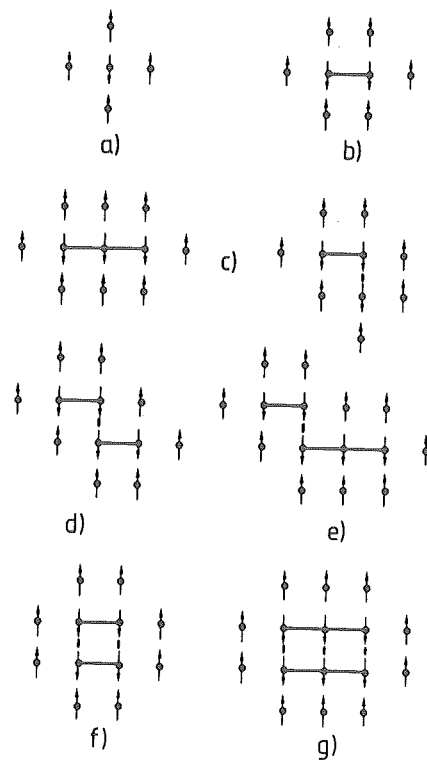


Fig. 5.3

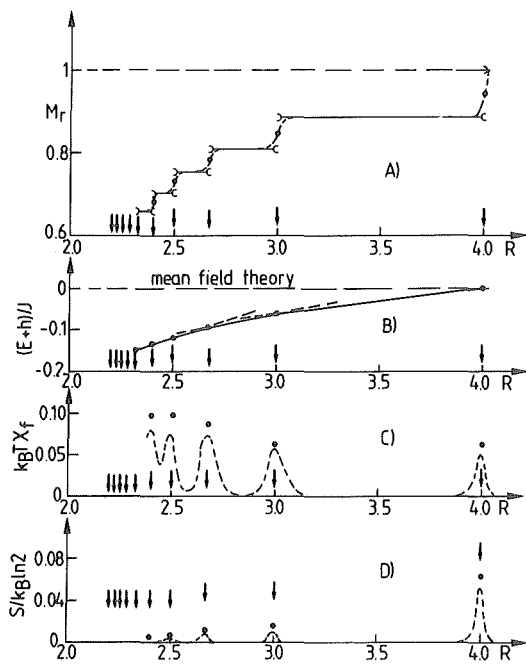


Fig. 5.4

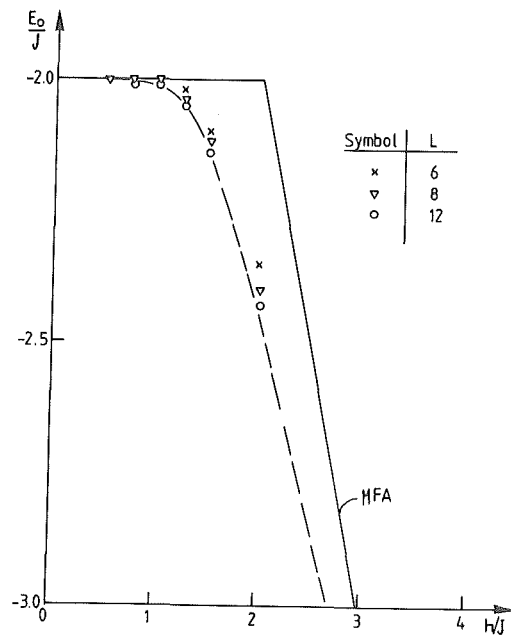


Fig. 5.5

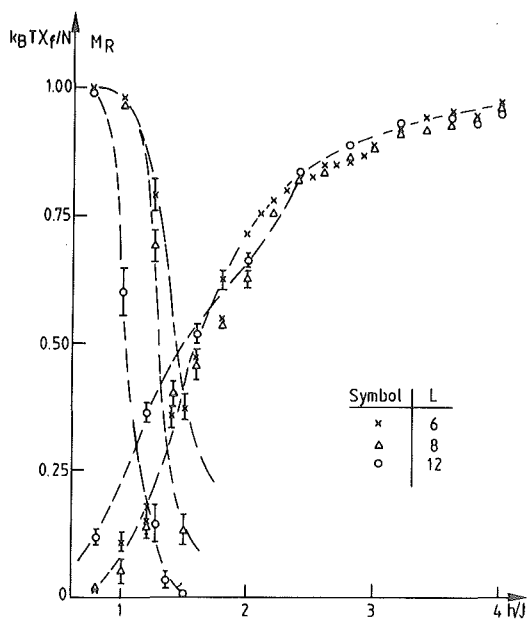


Fig. 5.6

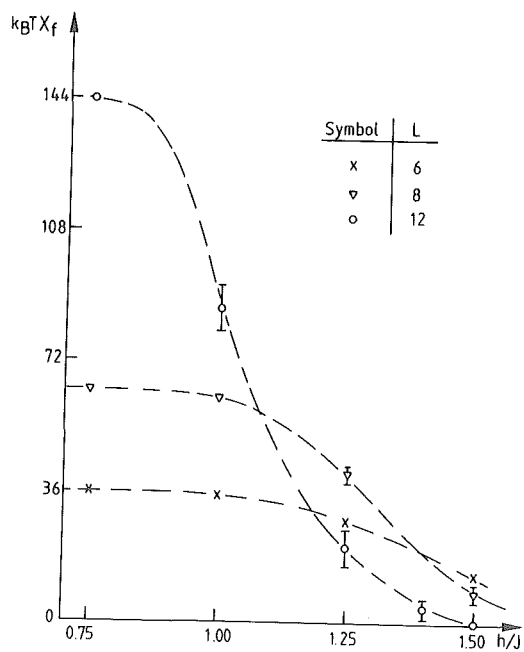


Fig. 5.7a)

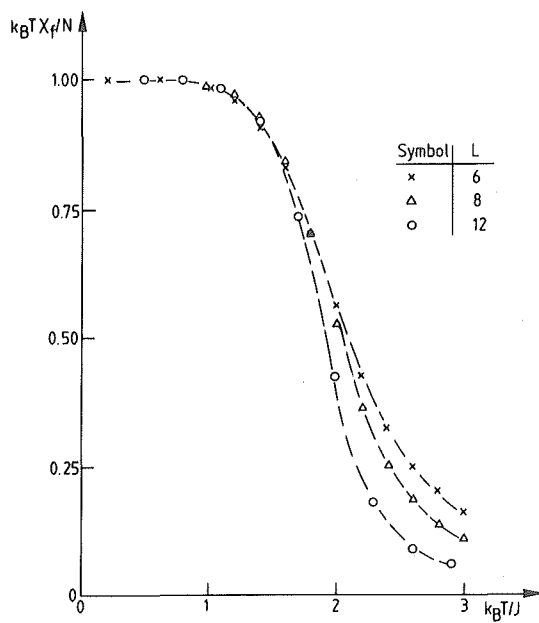


Fig. 5.7b)

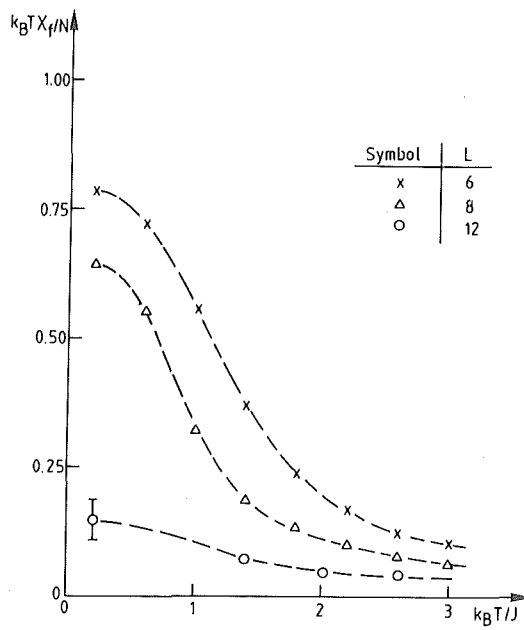


Fig. 5.8a)

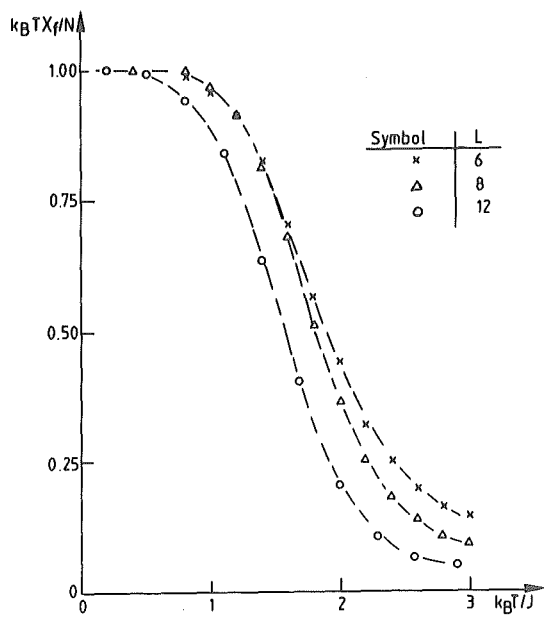


Fig. 5.8 b)

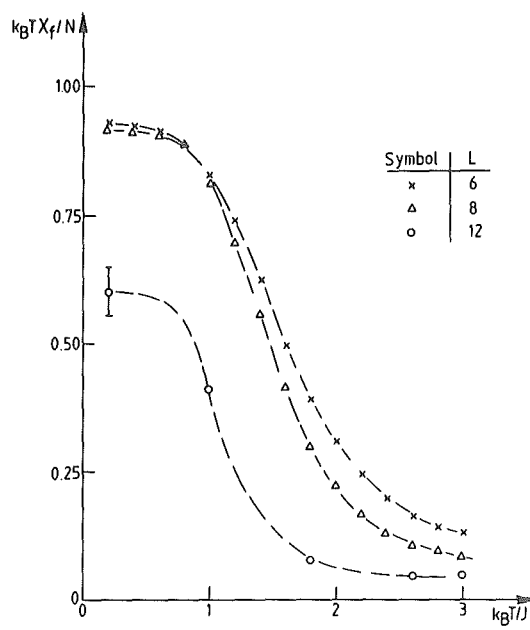


Fig. 5.8 c)

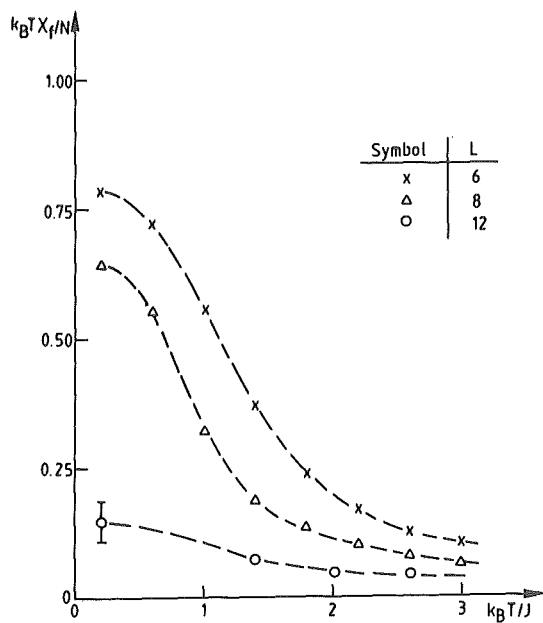


Fig. 5.8 d)

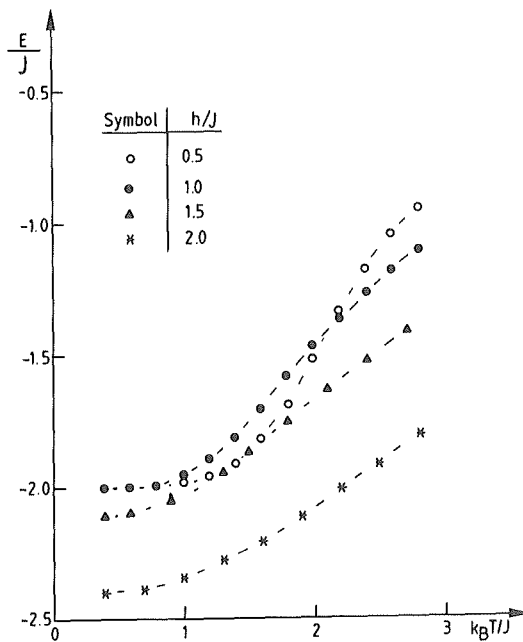


Fig. 5.9

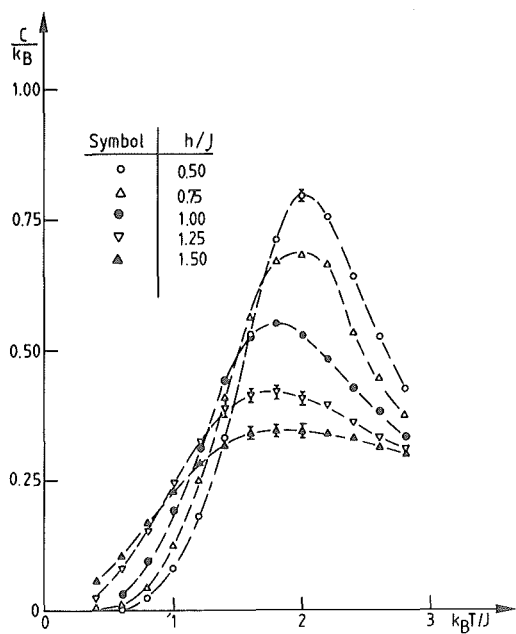


Fig. 5.10 a)

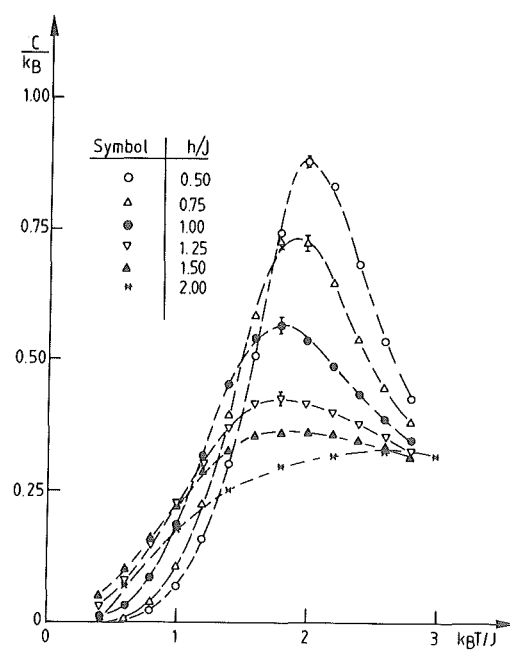


Fig. 5.10 b)

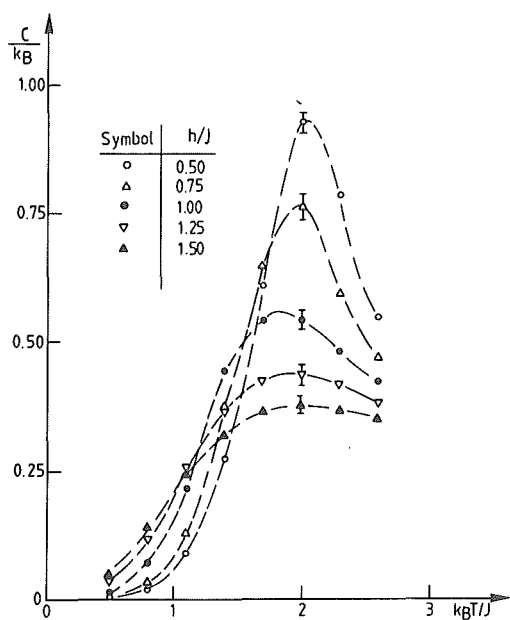


Fig. 5.10 c)

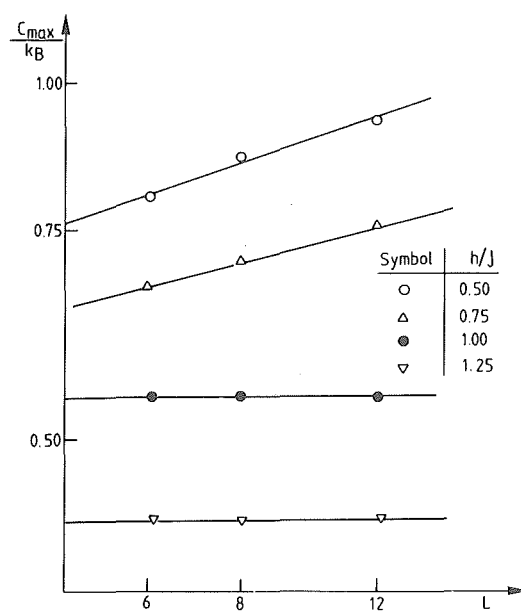


Fig. 5.11

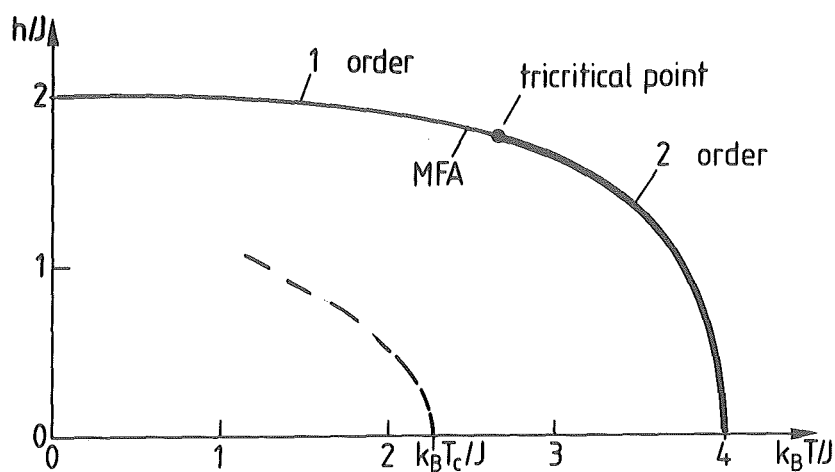


Fig. 5.12

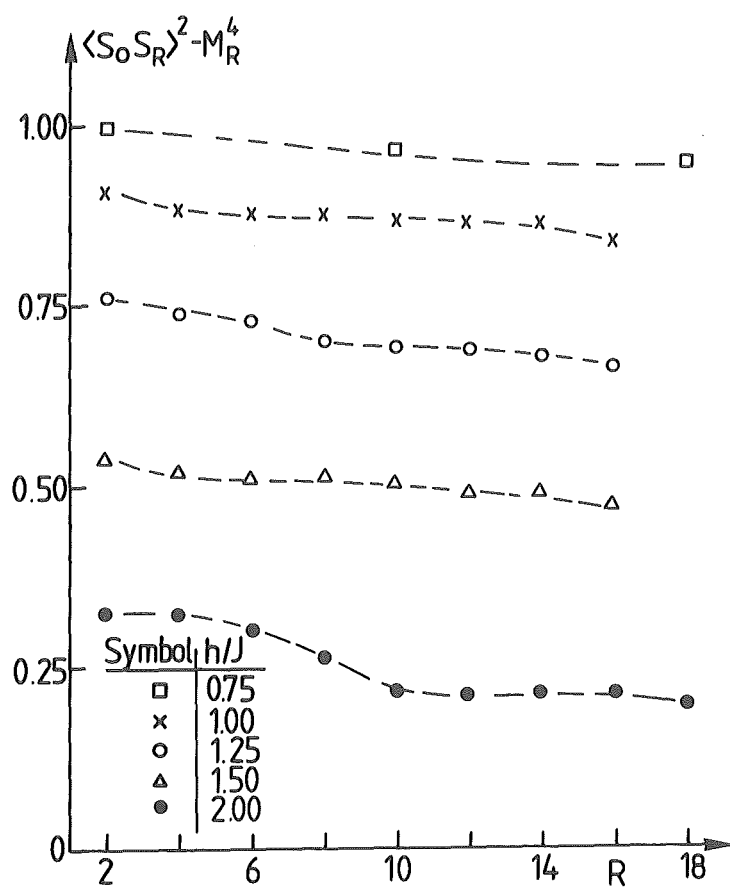


Fig. 5.13

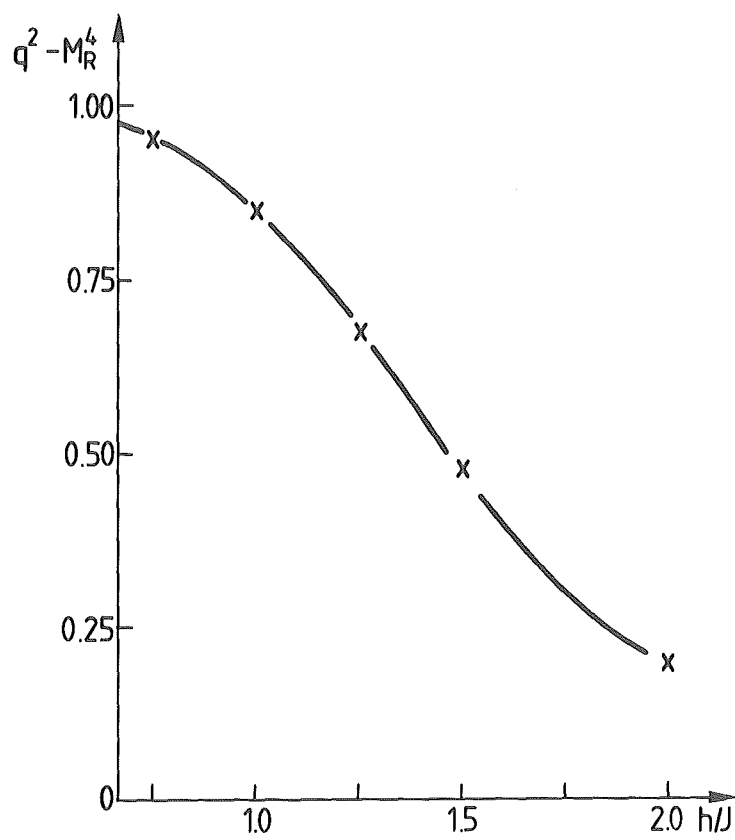


Fig. 5.14

KAPITEL 6

Zusammenfassung

a) Spin Gläser

- i) Sowohl das zweidimensionale "+ J"- als auch das "Gauß"-Modell für Spingläser haben nur bei $T=0$ einen Phasenübergang. Für $T \neq 0$ sind alle Spinglas-Ordnungsparameter Null. Im "+ J-Modell" verschwinden die Ordnungsparameter sogar bei $T=0$, während die Korrelationsfunktion $\{ \langle S_i S_j \rangle_T^2 \}_{av}$ nach einem Potenzgesetz mit dem Abstand abfällt. Im "Gauß-Modell" ist der Ordnungsparameter bei $T=0$ gleich 1. Bei von Null verschiedener Temperatur fällt die Korrelationsfunktion exponentiell mit dem Abstand ab. Die entsprechende Korrelationslänge divergiert für $T \rightarrow 0$. Die nur in erster Ordnung berechnete Hochtemperaturentwicklung $\xi_{EA} \approx 2 (J/k_B T)$ (bzw. $2(\Delta J/k_B T)$ im "Gauß-Modell") zeigt eine überraschend gute Übereinstimmung über einen relativ breiten Temperaturbereich. Die Divergenz der Korrelationslänge ist damit weit schwächer als im eindimensionalen (nicht frustrierten) Fall, wo die Korrelationslänge exponentiell divergiert für ein System bei seiner unteren Grenzdimension (l_{cd}). Unsere Resultate legen den Schluß nahe, daß die Korrelationslänge in frustrierten Spinglas-Systemen für $T \rightarrow 0$ wie ein Potenzgesetz, das nur von der Temperatur abhängt, divergiert - in Analogie zum eindimensionalen n-Vektor-Modell für $n \geq 2$. Da in diesem Fall die Dimension kleiner als die untere kritische ist ($l_{cd}=2$), widersprechen unsere Resultate nicht der Annahme, daß $d=2$ unterhalb, also nicht bei der unteren kritischen Dimension eines frustrierten Ising-Spinglases liegt.
- ii) Die Entropie des "+ J-Modells" erreicht einen positiven von Null verschiedenen Wert bei $T=0$ ($S/k_B \approx 0.075$) in guter Übereinstimmung mit anderen Näherungen. Im "Gauß-Modell" finden wir $S(T=0)=0$ für $N \rightarrow \infty$. S und die spezifische Wärme zeigen eine lineare Abhängigkeit über einen weiten Temperaturbereich. Dieses Resultat konnte von früheren Monte-Carlo-Rechnungen nicht angegeben werden wegen der äußerst langsamen Relaxationsphänomene

bei tiefen Temperaturen. Bei hohen Temperaturen stimmen unsere Resultate sehr gut mit den MC-Daten überein. Für das "+ J-Modell" gilt die gleiche Übereinstimmung, allerdings variiert die spezifische Wärme bei tiefen Temperaturen exponentiell. Es sei noch angemerkt, daß unsere Resultate mit der "Regel" übereinstimmen, daß bei von Null verschiedener Entropie für $T=0$ keine Grundzustandsordnung auftritt, während bei $S=0$ das Gegenteil zutrifft.

iii) Die Phasengrenze Ferromagnet-Paramagnet wurde für das "asymmetrische + J-Modell" als Funktion negativer Bindungen (Konzentration x) betrachtet. Wir finden, daß der Ferromagnetismus bei $x_c \approx 0.12$ verschwindet - in guter Übereinstimmung mit früheren Resultaten.

iv) Die Beobachtungszeiten, die nötig sind, um in Monte-Carlo-Rechnungen Gleichgewicht zu erreichen, wurden untersucht. Bei tiefen Temperaturen ergibt sich ein dramatisches Anwachsen der notwendigen Zeiten mit zunehmender Systemgröße. Da gute Gründe existieren, daß Monte-Carlo-Rechnungen für Spingläser die auftretenden Dynamiken relativ gut simulieren (vgl. Ref. 11), erwarten wir, daß auch reale makroskopische Spingläser durch ein unvollständiges thermisches Gleichgewicht der Spins charakterisiert sind. Das System verbleibt relativ lange Zeit in der Nähe einer seiner Grundzustände (oder seiner tiefliegenden metastabilen Zustände), bis eine Umordnung schon ziemlich großer Cluster dazu führt, daß es in ein anderes "Tal" im Konfigurationsraum über die umgebenden Energiebarrieren gelangt. Dieses Verhalten unterscheidet sich wesentlich vom Néel-Bild "magnetischer Wolken" /58/ und zwar weil die Cluster keine isolierten wohldefinierten Bereiche sind, sondern sich gegenseitig überlappen, d.h. es existieren Spins, die zu einer Zeit t_1 zu einem Cluster gehören, während sie bei t_2 zu einem neuen Cluster gezählt werden müssen (usw.). Das Anwachsen der magnetischen Korrelationen bei tiefer werdenden Temperaturen ist hingegen besser durch die berechneten Modelle beschrieben. Der Peak in der frequenzabhängigen Suszeptibilität in diesen Modellen hängt nicht mit einer wohldefinierten "Einfrier-Temperatur" T_f zusammen,

wie das die aufgeführten Monte-Carlo-Rechnungen gezeigt haben. Unterhalb T_f ist ein Edwards-Anderson-Ordnungsparameter metastabil für relativ lange Zeiten (Fig. 3.2, 3.3).

Zusammenfassend ist zu sagen, daß das Verhalten zweidimensionaler Ising-Modelle im wesentlichen nach dieser Arbeit gut zu verstehen ist. Es wäre sicherlich wünschenswert, die Statistik der Resultate zu verbessern und zu größeren Systemen zu gehen. Allerdings war zur Anfertigung der vorliegenden Arbeit ein Rechenzeitaufwand von rund 500 Stunden auf einer IBM 370/368 notwendig.

b) Zweidimensionales Gitter mit random-verteilter vertikaler Bindung

Dieses Modell läßt sich für relativ große Systemgrößen ($L \approx 1600$) numerisch exakt lösen. Wegen der fehlenden Frustrationseffekte, zeigt es bei allen Verteilungen $P\{E_2(i)\}$ einen Phasenübergang bei einer wohldefinierten kritischen Temperatur T_c . T_c läßt sich mit Hilfe einer impliziten Gleichung ermitteln, Gl. (4.20). Der Peak in der spezifischen Wärme sowie der Wendepunkt in der Boundary-Magnetisierung stimmen mit diesem T_c überein. Der Grundzustand hängt von der Art der Random-Verteilung ab. Existieren nur positive Bindungen, so ist der Grundzustand rein ferromagnetisch. Kommen noch negative Bindungen hinzu, entstehen Linien mit negativen Spins. Falls eine Bindung $E_2(i)=0$ eine endliche Wahrscheinlichkeit aufweist, das Gitter also quasi durchgeschnitten wird, entfällt der Phasenübergang, da das System quasi eindimensional wird. Der Einfluß des Boundary-Magnetfelds verschwindet in der spezifischen Wärme bei $N \rightarrow \infty$. Infolge der Random-Verteilung tritt ein Rundungs-Effekt beim Maximum der spezifischen Wärme auf, der von der Art der Verteilung wesentlich abhängt. So ist diese Rundung bei einer Gauß-Verteilung weit ausgeprägter als bei einer Doppel-Delta-Verteilung.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß das System die erwarteten Eigenschaften, insbesondere den Phasenübergang, zeigt. Der Phasenübergang nur bei $T=0$ in den beiden Spinglas-Modellen ist also im wesentlichen auf die vorhandenen Frustrations-effekte zurückzuführen.

c) Random-Field-Modell

Für dieses Modell haben wir gezeigt, daß für $T=0$ eine unendliche Anzahl von Phasenübergängen (1. Ordnung) als Funktion des Random-Feldes im Bereich $2 \leq k/J \leq 4$ bei Werten $k/J = 2+2/n$, $n=1,2,\dots$ auftritt. Im Bereich $0 < k/J \leq 2$ existieren sogar nicht abzählbar unendlich viele schwache Singularitäten, wenn k/J gleich einer rationalen Zahl in diesem Bereich ist. Eine spontane Magnetisierung existiert nicht, sogar für beliebig kleine Random-Felder k . Dies gilt auch für $T=0$. Bei $T>0$ werden die Singularitäten schon bei Temperaturen von rund $1/10$ der kritischen Temperatur des reinen Systems herausgeglättet. Für genügend kleine k findet ein "Übergang" zu einem quasi-ferromagnetischen Zustand in ziemlich großen Domänen bei $T_c^{\text{eff}}(k)$ statt. Wegen der auftretenden Finite-Size-Effekte können wir nicht zwischen der Möglichkeit eines wahren Übergangs mit divergierender Korrelationslänge und Suszeptibilität und der eines gerundeten Übergangs unterscheiden, bei dem die Korrelationslänge nur bis zu einem hohen aber endlichen Wert innerhalb eines ziemlich schmalen Temperatur-Intervalls ansteigt. Rechnungen zu den Korrelationsfunktionen $\langle S_o S_R \rangle^2$ zeigen, daß unterhalb eines kritischen Feldes $h_c/J = 2.0$ der Ordnungsparameter q^{2-M_R} von Null verschieden ist.

Literaturverzeichnis

- /1/ For recent reviews see: P.W. Anderson, J. Appl. Phys. 49, 1599 (1978), and in Amorphous Magnetism II (Lewy, R.A., and Hasegawa, R., eds.) p. 1 (New York, Plenum Press 1977); A. Blandin, J. phys. (Paris) 39, C6-1499 (1978); K. Binder *ibid*, C6-1527, and in Ordering in Strongly-Fluctuating Condensed-Matter Systems (T. Riste, ed., New York, Plenum Press 1979); C. de Dominicis, in Dynamic Critical Phenomena (Springer, Berlin-Heidelberg-New York 1979).
- /2/ S.F. Edwards and P.W. Anderson, J. Phys. F5, 965 (1975).
- /3/ D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 35, 1792 (1975).
- /4/ D.J. Thouless, P.W. Anderson and R.G. Palmer, Phil. Mag. 35, 593 (1977).
- /5/ H.-J. Sommers, Z. Phys. B31, 301 (1978); B32, 173 (1979).
- /6/ A.J. Bray and M.A. Moore, Phys. Rev. Lett. 41, 1068 (1979), and preprint; see also C. De Dominicis and T. Garce, J. phys. lett. 24, L575 (1979).
- /7/ G. Parisi, Phys. Rev. Lett. 43, 1754 (1979), and preprint.
- /8/ For recent reviews of experimental work on spin glasses, see e.g. J.A. Mydosh, J. Mag. Mag. Mat. 7, 237 (1978), and in Amorphous Magnetism II (Lewy, R.A., and Hasegawa, R., eds.), p. 73 (New York, Plenum Press 1977); P.A. Beck, Progr. Mat. Sci. 23, 1 (1978); A.P. Murani, J. phys. (Paris) 39, C6-1517 (1978), and J. Appl. Phys. 49, 1604 (1978); J. Souletie, J. phys. (Paris) 39, C2-3 (1978).
- /9/ K. Binder and K. Schröder, Phys. Rev. B14, 2142 (1976).
- /10/ K. Binder and D. Stauffer, Phys. Lett. A57, 177 (1976).

- /11/ K. Binder, Z. Physik B26, 339 (1977).
- /12/ S. Kirkpatrick, Phys. Rev. B16, 4630 (1977).
- /13/ S. Kirkpatrick, in Ordering in Strongly-Fluctuating Condensed-Matter Systems (Riste, T., ed., New York, Plenum Press 1979).
- /14/ A.J. Bray and M.A. Moore, J. Phys. F7, L333 (1977);
A.J. Bray, M.A. Moore and P. Reed, J. Phys. C11, 1187 (1978).
- /15/ D. Stauffer and K. Binder, Z. Phys. B30, 313 (1978).
- /16/ D. Stauffer and K. Binder, Z. Phys. B34, 97 (1979).
- /17/ J.S. Denbigh, preprint.
- /18/ A.J. Bray, M.A. Moore and P. Reed, J. Phys. C12, L447 (1979).
- /19/ C. Dasgupta, S.-K. Ma and C.-K. Hu, Phys. Rev. B20, 3837 (1979).
- /20/ R. Rammal, R. Suchail and R. Maynard, Solid State Commun. 32, 487 (1979).
- /21/ J.F. Fernandez and R. Medina, Phys. Rev. B19, 3561 (1979).
- /22/ P.W. Anderson and C.M. Pond, Phys. Rev. Lett. 40, 903 (1978).
- /23/ W. Kinzel and K.H. Fischer, J. Phys. C11, 2115 (1978),
and references therein.
- /24/ A.B. Harris, T.C. Lubensky and J.H. Chen, Phys. Rev. Lett. 36, 415 (1976).

- /25/ E. Pytte and J.S. Rudnick, Phys. Rev. B19, 3603 (1979).
- /26/ J.R. de Almeida and D.J. Thouless, J. Phys. A11, 983 (1978).
- /27/ A.J. Bray and M.A. Moore, J. Phys. C12, 79 (1979).
- /28/ R. Fisch and A.B. Harris, Phys. Rev. Lett. 38, 785 (1977).
- /29/ R.V. Ditzian and L.P. Kadanoff, Bull. Am. Phys. Soc. 24 (1979), and private communication.
- /30/ G. Toulouse, Comm. Phys. 2, 115 (1977).
- /31/ J. Vannimenus and G. Toulouse, J. Phys. C10, L537 (1977).
- /32/ J. Vannimenus and L. de Séze, to be published.
- /33/ I. Bieche, R. Maynard, R. Rammal and J.P. Uhry, J. Phys. A (1980).
- /34/ P. Reed, A.J. Bray and M.A. Moore, J. Phys. C11, L139 (1978).
- /35/ B. Derrida, J.M. Maillard, J. Vannimenus and S. Kirkpatrick, J. phys. (Paris) 39, L465 (1978).
- /36/ I.E. Dzyaloshinskii and G.E. Volovik, J. phys. 39, 693 (1978).
- /37/ J.A. Hertz, Phys. Rev. B18, 4875 (1978).
- /38/ D.C. Mattis, Phys. Lett. 56A, 421 (1976); J.M. Luttinger, Phys. Rev. Lett. 37, 778 (1976); A. Aharony and Y. Imry, Solid State Commun. 20, 899 (1976).
- /39/ J. Villain, Les Houches Lecture Notes 1978 (to be published).

- /40/ D.J. Elderfield, preprint.
- /41/ A. Aharony and K. Binder, J. Mag. Mag. Mat. (in press), and preprint.
- /42/ A very brief account of some of our results was given earlier in I. Morgenstern and K. Binder, Phys. Rev. Lett. 43, 1615 (1979).
- /43/ K. Binder, physica 62, 508 (1972).
- /44/ In models with random magnetic fields one rather keeps the exchange J constant and Eq. (9) has to be replaced by $[\dots]_{av} = \sum_i \int dH_i P(H_i) \dots$; applications of our method to this case will be described elsewhere.
- /45/ I. Ono, J. Phys. Soc. Japan 41, 345 (1976); see also, E. Domany, J. Phys. C12, L119 (1979), who obtains $x_c \approx 0.16$ from replica methods.
- /46/ The definition of the Edwards-Anderson order parameter in Monte-Carlo simulations is discussed in /9-11,15/.
- /47/ K. Binder (ed.) Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Springer, Berlin-Heidelberg-New York 1979).
- /48/ L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- /49/ M.E. Fisher, in Critical Phenomena (Green, M.S., ed., Academic Press, New York 1971).
- /50/ One of us (K.B.) is indebted to helpful discussions with B.I. Halperin and D.J. Thouless on this point.
- /51/ W. Selke and M.E. Fisher, Phys. Rev. B20, 257 (1979); P. Bak and J. von Boehm, preprint.
- /52/ J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. C6, 1181 (1973).

- /53/ J. Stephenson, J. Math. Phys. 11, 420 (1970).
- /54/ D. Meschede, F. Steglich, H. Maletta and W. Zinn, Phys. Rev. Lett. 44, 102 (1980).
- /55/ P. Reed, J. Phys. C12, L799 (1979).
- /56/ A.P. Young, in Amorphous Magnetism II (Lewy, A.R., and Hasegawa, R., eds.) p. (New York, Plenum Press 1977).
- /57/ C. Jayaprakash, E.K. Riedel, and M. Wortis, Phys. Rev. B18, 2244 (1978); H.A. Algra, L.J. de Jongh and J. Reedijk, Phys. Rev. Lett. 42, 6061 (1979).
- /58/ L. Néel, Ann. Geophys. 5, 99 (1949); J.L. Tholence and R. Tournier, J. phys. (Paris) 35, C4-229 (1974); P.A. Beck, in Ref. /8/.
- /59/ See e.g. the reviews of T.C. Lubensky, in Ill-Condensed Matter (R. Balieu, R. Maynard, G. Goulouse, eds.) (in press) North-Holland, Amsterdam 1979; C. de Dominicis, in Critical Dynamics (C.P. Enz, ed.) Springer, Berlin-Heidelberg-New York 1979, and A. Aharony, J. Magn. Mag. Mat. 7, 198 (1978).
- /60/ Y. Imry and S.-K. Ma, Phys. Rev. Lett. 35, 1399 (1975); see also P. Lacour-Gayet and G. Toulouse, J. phys. (Paris) 35, 425 (1974).
- /61/ G. Grinstein, Phys. Rev. Lett. 37, 944 (1976).
- /62/ A. Aharony, Y. Imry and S.-K. Ma, Phys. Rev. Lett. 37, 1364 (1976).
- /63/ T. Schneider and E. Pytte, Phys. Rev. B15, 1519 (1977).
- /64/ A.P. Young, J. Phys. C10, L257 (1977)

- /65/ H.G. Schuster, Phys. Lett. 60A, 89 (1977).
- /66/ A. Aharony, Phys. Rev. B18, 3318 (1978); ibid. 3328 (1978).
- /67/ S. Fishman and A. Aharony, in Proc. Int. Conf. Magnetism, Munich 1979, in press, and J. Phys. C12, L729 (1979).
- /68/ A.J. Bray, Phys. Lett. A74, 129 (1979), and J. Phys. C (1980) in press.
- /69/ H. Rohrer and H.J. Scheel, IBM Zürich, Res. Lab. preprint.
- /70/ D.P. Landau, H.H. Lee, and W. Kao, J. Appl. Phys. 49, 1356 (1978).
- /71/ McCoy and Wu "The Two-Dimensional Ising Model" Harvard 1973).
- /72/ I. Morgenstern and K. Binder, J. Chem. Phys. 69, (1) 153.
- /73/ H. Fürstenberg, Trans. Am. Math. Soc. 108, 377 (1963).
- /74/ L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- /75/ J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. C6, 1181 (1973).
- /76/ I. Morgenstern and K. Binder, Phys. Rev. Lett. 43, 1615 (1979), Phys. Rev. B
- /77/ I. Morgenstern, Thesis, Universität des Saarlandes, Saarbrücken/W-Germany 1980 (unpublished).
- /78/ M. Puma and J.F. Fernandez, Phys. Rev. B18, 1391 (1978); See also I. Morgenstern, K. Binder, and A. Baumgärtner, J. Chem. Phys. 69, 253 (1978).
- /79/ We use here the terminology familiar from percolation theory, cf. e.g. D. Stauffer, Phys. Repts. 51, 1 (1979).

/80/ M. Suzuki, S. Miyashita, A. Kuroda and C. Kawabata,
Phys. Lett. 60A, 478 (1977).

Herrn Prof. Dr. K. Binder danke ich sehr herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit sowie für seine immerwährende Diskussionsbereitschaft und Kritik während ihrer Anfertigung.